# Experimentelle Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation höher ionisierter Atome

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum

von
**Peter Greve**
aus Essen

Bochum 1981

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41544708_0032

# Experimentelle Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation höher ionisierter Atome

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
der Abteilung für Physik und Astronomie
an der Ruhr-Universität Bochum

von
**Peter Greve**
aus Essen

Bochum 1981

Dissertation eingereicht am : 23.10.81
Tag der mündlichen Prüfung : 2.12.81
Referent : Prof. Dr. H.-J. Kunze
Korreferent : Prof. Dr. P.H. Heckmann

UNIV. LEIDEN BIBL.

I N H A L T


| | | |
|---|---|---|
| 1. | EINLEITUNG | 1 |
| 2. | GRUNDLAGEN DER MESSUNGEN | 3 |
| 2.1 | Die plasmaspektroskopische Methode | 3 |
| 2.2 | Der Theta-Pinch | 10 |
| 2.3 | Die Lichtstreuung | 17 |
| 2.4 | Die Spektroskopie | 22 |
| 2.5 | Das Injektionssystem | 30 |
| 3. | MESSUNGEN | 37 |
| 3.1 | Framing- und Streakaufnahmen | 39 |
| 3.2 | Bestimmung der Plasmalänge | 45 |
| 3.3 | Elektronendichte und Temperatur | 52 |
| 3.4 | Ionentemperatur | 57 |
| 3.5 | Spektroskopische Messungen | 59 |
| 3.6 | Auswertung | 65 |
| 3.7 | Ratenkoeffizienten | 69 |
| 4. | THEORIE | 72 |
| 4.1 | Klassische Ansätze | 72 |
| 4.2 | Quantenmechanische Ansätze | 75 |
| 4.3 | Aktuelle theoretische Ansätze | 81 |
| 4.4 | Empirische Ansätze | 92 |
| 5. | DISKUSSION DER ERGEBNISSE | 96 |
| 5.1 | Wasserstoffähnliche Ionen | 96 |
| 5.2 | Heliumähnliche Ionen | 98 |
| 5.3 | Lithiumähnliche Ionen | 104 |
| 5.4 | Berylliumähnliche bis neonähnliche Ionen | 114 |
| 5.5 | Natriumähnliche Ionen | 120 |
| 5.6 | Weitere isoelektronische Sequenzen | 123 |
| 5.7 | Messungen mit Krypton | 125 |
| 5.8 | Ergänzende Bemerkungen | 126 |
| 6. | ZUSAMMENFASSUNG | 130 |
| 7. | LITERATURVERZEICHNIS | 131 |
| ANHANG | | 140 |

## 1. EINLEITUNG

Ratenkoeffizienten für die Elektronenstossionisation bestimmen maßgeblich die Zeitkonstanten, mit denen Atome und Ionen in einem Plasma ionisiert werden. Dies gilt auch für Verunreinigungsionen, die von der Wand oder dem Limiter des Entladungsgefäßes freigesetzt werden und in das Plasma eindringen. Die Berechnung der räumlichen und zeitlichen Verteilung der einzelnen Ionisationsstufen solcher Verunreinigungsatome aus den Plasmaparametern der Entladung setzt daher die Kenntnis der entsprechenden Raten voraus /1/.

Für ein Plasma im Corona-Gleichgewicht wird die Besetzungsdichte $N_z$ in den einzelnen Ladungszuständen z sogar unabhängig von der Elektronendichte allein durch das Verhältnis der Ratenkoeffizienten für die Ionisation $S_z$ und die Rekombination $\alpha_z$ bestimmt, welche selbst nur eine Funktion der Elektronentemperatur sind.

$$\frac{N_z}{N_{z-1}} = \frac{S_{z-1}}{\alpha_z} \qquad (1)$$

Die Linienstrahlung, die ein heißes Plasma emittiert, stammt im wesentlichen von den Verunreinigungsionen /2/. Die Berechnung der Strahlungsverluste erfordert eine anteilige Berücksichtigung der einzelnen Ionisationsstufen. Ratenkoeffizienten für die Elektronenstossionisation gehen somit auch entscheidend in die energetischen Abschätzungen für thermonukleare Fusionsreaktoren ein /3/.

Auf der anderen Seite stellt die Analyse der Strahlung hochionisierter Atome eine wichtige Diagnostiktechnik für astrophysikalischen Plasmen dar /57/. Neuerdings werden auch Plasmen, die auf Grund ihrer kleinen räumlichen Ausdehnung anderen

Diagnostikmöglichkeiten schwer zugänglich sind, verstärkt mit Hilfe der Linienstrahlung hochionisierter Atomen untersucht /4/. Die Berechnung der Plasmaparameter aus den spektroskopischen Daten setzt auch hier die Kenntnis der unterschiedlichsten Raten, darunter die Ionisationsraten, voraus.

Umgekehrt lassen sich aus der Linienstrahlung eines Laborplasmas, dessen Elektronendichte und Temperaturverlauf bekannt ist, unter geeigneten Bedingungen effektive Ratenkoeffizienten für die Elektronenstossionisation bestimmen. Diese Technik wurde schon desöfteren angewandt /8/. Die Ergebnisse sind jedoch keineswegs einheitlich. Insbesondere im Vergleich mit theoretischen Ansätzen und den aus "crossed-beam" Experimenten gewonnenen Daten sind noch viele Fragen offen.

Mit dieser Arbeit sollte ein Beitrag zur Klärung der Probleme geleistet werden. Dabei verfolgten wir insbesondere folgende Ziele:

1. die Elemente von Bor bis Neon sollten noch einmal systematisch untersucht werden;
2. durch eine Verlängerung der Lebensdauer des Plasmas sollten höhere Ionisationsstufen als bisher erreicht werden;
3. Verunreinigungen, die dem Füllgas nicht gasförmig zugemischt werden können, sollten durch ein neuartiges Ablationsverfahren in das Plasma eingebracht werden.

## 2. GRUNDLAGEN DER MESSUNGEN

### 2.1 Die plasmaspektroskopische Methode

Zur Bestimmung von Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation sind im Augenblick zwei Methoden gängig, die "crossed-beam" Methode und die plasmaspektroskopische Methode.

Die "crossed-beam" Methode ist ausführlich in den Arbeiten von Dolder und Peart /5/, Harrison /6/ sowie Dunn /7/ beschrieben. Ein Strahl gleichartig ionisierter Atome wird in einem Hochvakuumgefäß mit monoenergetischen Elektronen beschoßen, die unter $90^{\circ}$ zur Flugrichtung des Ionenstrahls einfallen. Nach erfolgter Wechselwirkung mißt man die Abschwächung des ursprünglichen Ionenstrahls, die Anzahl der weiterionisierten Ionen, sowie die Abschwächung des Elektronenstrahls. Hieraus läßt sich der absolute Wirkungsquerschnitt des betrachteten Ionisationsprozesses bestimmen.

Durch Variation der Beschleunigungsspannung des Elektronenstrahls kann man die Abhängigkeit des Wirkungsquerschnittes von der kinetischen Energie der Elektronen messen. Den Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation bei einer Elektronentemperatur $T_e$ erhält man als Produkt aus Wirkungsquerschnitt und Relativgeschwindigkeit gemittelt über die der Temperatur entsprechenden maxwellschen Verteilungsfunktion $f_T(v)$

$$S(T_e) = \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma(v) \cdot v \cdot f_T(v) \cdot dv \qquad (2)$$

Bei der plasmaspektroskopischen Methode hingegen bestimmt man die Ratenkoeffizienten $S(T_e)$ direkt, ohne Kenntnis der detallierten Wirkungsquerschnitte.

In einem schnell aufgeheizten Plasma durchlaufen Verun-

reinigungsatome nacheinander die einzelnen Ionisationsstufen. Legt man das Korona-Modell zu Grunde, so geschieht die Bevölkerung angeregter Zustände einer Ionisationsstufe durch Elektronenstöße vom Grundzustand aus. Die Entvölkerung der angeregten Niveaus geschieht in diesem Modell hauptsächlich durch spontane Emission mit Zeitkonstanten von $10^{-8}$ s und kleiner. Man kann daher annehmen, daß die Ionen eines Ladungszustandes sich im wesentlichen im Grundzustand befinden.

Die zeitabhängige Verteilung der Ionen eines vorgegebenen Elementes über die einzelnen Ladungszustände ergibt sich aus der simultanen Lösung eines Satzes von Ratengleichungen der Form:

$$\cdots$$

$$\frac{d N_{z-1}}{d t} = N_e \left(S_{z-2} N_{z-2} + \alpha_z N_z - S_{z-1} N_{z-1} - \alpha_{z-1} N_{z-1}\right)$$

$$\frac{d N_z}{d t} = N_e \left(S_{z-1} N_{z-1} + \alpha_{z+1} N_{z+1} - S_z N_z - \alpha_z N_z\right) \qquad (3)$$

$$\frac{d N_{z+1}}{d t} = N_e \left(S_z N_z + \alpha_{z+2} N_{z+2} - S_{z+1} N_{z+1} - \alpha_{z+1} N_{z+1}\right)$$

$$\cdots$$

Quellterme und Transportterme sind hierbei nicht berücksichtigt. Auf ihre Bedeutung kommen wir später zurück.

Als Nebenbedingung gilt, daß die Summe über alle Zustände z die absolute Verunreinigungsdichte N ergibt.

$$\sum_z N_z = N \qquad (4)$$

$S_z$ und $\alpha_z$ sind die totalen effektiven Ratenkoeffizienten für die Ionisation bzw. Rekombination. Sie hängen außer von atomaren Parametern wie Ionisationsenergie und Elektronenkonfiguration nur noch von der Elektronentemperatur des

Plasmas ab. Eine Ausnahme bildet die Dreierstoßrekombination, die explizit von der Elektronendichte abhängt.

Die Ratengleichungen ( 3 ) reduzieren sich für den Fall des Korona-Gleichgewichtes zu der Beziehung ( 1 ). Für ein transientes Plasma jedoch müssen sie unter Vorgabe des zeitabhängigen Elektronendichte und Temperaturverlaufs simultan gelöst werden, um die Besetzungsdichten in den einzelnen Ionisationszuständen als Funktion der Zeit zu erhalten.

Geschieht die Aufheizung des Plasmas schnell genug, so sind die Ionen weit vom Ionisationsgleichgewicht entfernt. In diesem Fall können die Rekombinationsraten meist vernachlässigt werden. Der zeitliche Ablauf des Ionisationsprozesses wird dann allein durch den Elektronendichte und Temperaturverlauf und die Ionisationsraten bestimmt. Er läßt sich unter geeigneten Bedingungen an Hand von Spektrallinien aus den einzelnen Ladungszuständen verfolgen.

Für einen erlaubten, optisch dünnen Übergang, dessen oberes Niveau nur durch Elektronenstoßanregung vom Grundzustand aus bevölkert wird, ist der Emissionskoeffizient $\epsilon_{ki}$ direkt proportional zur Besetzungsdichte des Grundzustandes /8/ :

$$\epsilon_{ki}(t) = (h\nu/4\pi)\,(A_{ki}/\sum_{i<k} A_{kl})\; N_z(t)\; N_e(t)\; X_{gi}(T_e(t)) \qquad (5)$$

Sind die Abhängigkeiten $X_{gi}(T_e(t))$ und $N_e(t)$ bekannt, so läßt sich der Zeitverlauf der Linie aus dem Zeitverlauf des Grundzustandes $N_z(t)$ berechnen.

Für die Bestimmung der Ionisationsraten sind, wie wir später noch sehen werden, nicht die absoluten Intensitäten der gemessenen Spektrallinien maßgebend, sondern nur ihr zeitlicher Verlauf. Daher braucht die benutzte Formel für die Anregungsraten $X_{gi}$ nur die richtige Temperaturabhängigkeit aufzuweisen.

Für den vorkommenden Temperaturbereich bis 300 eV ist dies für die effektive Gaunt-Faktor Näherung der Fall /9/.

$$X_{gi}(T_e) = \frac{1{,}6\cdot 10^{-5}\cdot f_{ig}\,\langle\bar{g}\rangle}{\Delta E\cdot\sqrt{kT_e}}\ \exp(-\Delta E/kT_e)\ \ cm^3\cdot s^{-1} \qquad (6)$$

mit $\Delta E$ und $kT_e$ in eV

Der gemittelte effektive Gaunt-Faktor $\langle\bar{g}\rangle$ ist für Dipolübergänge bei van Regemorter tabelliert /10/.

Ferner benötigt man für die numerische Lösung der Ratengleichungen noch eine Näherungsformel für die Ionisationsratenkoeffizienten $S_z$. Wegen der einfachen analytischen Darstellbarkeit wählen wir die semiempirische Formel von Kunze /11/

$$S_i(T_e) = 7{,}5\cdot 10^{-8}(r_i/E_i)\cdot\left[\left(\ln\frac{40kT_e}{E_i}\right)^3 + 40\right]\frac{kT_e}{E_i+3kT_e}\cdot\exp(-E_i/kT_e)$$

in $cm^3\cdot s^{-1}$ wenn $E_i$ und $kT_e$ in eV. (7)

$r_i$ ist die Anzahl der gleichwertigen Elektronen in der äußeren Schale des Ions.

Dieser angenommene Ratenkoeffizient wird für jede Ionisationsstufe mit einem variablen Faktor A(i) versehen

$$S_{i,eff}(T_e) = A(i)\cdot S_i(T_e) \qquad (8)$$

Mit Hilfe dieser Faktoren lassen sich innerhalb des numerischen Lösungsverfahrens der Ratengleichungen die Zeitverläufe der einzelnen Besetzungsdichten und damit auch die Zeitverläufe der entsprechenden Linienverläufe variieren. Wesentlich ist auch hier, daß die benutzte Formel die richtige Temperaturabhängigkeit aufweist, so daß die Faktoren A(i) nur noch von der Ionisationsstufe i abhängen.

Die effektiven Ionisationsraten werden dann bestimmt durch diejenigen Parameter A(i), welche die beste Anpassung der berechneten Linienverläufe an die experimentell bestimmten ergeben.

Die Wahl einer anderen Näherungsformel für die Ionisationsratenkoeffizienten innerhalb des numerischen Lösungsverfahrens ergibt in der Regel andere Faktoren A(i) für die optimale Anpassung, jedoch bleibt der effektive Ratenkoeffizient $S_{i,eff}$ gleich, solange die Temperaturabhängigkeit der benutzten Formel richtig ist. Die richtige Temperaturabhängigkeit der von uns benutzten Formel ( 7 ) wurde im Nachhinein dadurch bestätigt, daß die Koeffizienten A(i) für alle Ionen und Ladungszustände zeit- und temperaturunabhängig gewählt werden konnten.

Auf den Einfluß der Rekombination kommen wir in einem späteren Kapitel zurück.

### 2.1.2 Voraussetzungen und Randbedingungen

Bei der Anwendung der plasmaspektroskopischen Methode, wie sie im vorigen Abschnitt dargestellt wurde, müßen einige Effekte beachtet werden, die im Folgenden diskutiert werden sollen.

Die experimentelle Bestimmung der Elektronendichte und Temperatur des Plasmas geschieht meistens durch $90^{\circ}$ Thomson-Streuung in der Mitte des Entladungsgefäßes oder aber durch Interferometrie entlang der z-Achse der Entladung. In beiden Fällen ist die Information über die Homogenität des Plasmas unvollständig. Die axiale Homogenität zum Beispiel kann bei der interferometrischen Dichtebestimmung überhaupt nicht, bei der Thomson-Streuung nur mit großem experimentellem Aufwand festgestellt werden. Meistens wird sie jedoch einfach vorausgesetzt.

Dies ist bei Theta-Pinch Entladungen nicht unproblematisch. Wie schon in verschiedenen Experimenten beobachtet , können axiale Instabilitäten sowie zu den Enden auslaufende Dichtewellen auftreten /12,13/. Beide Effekte würden interferometrisch bestimmte Dichtewerte verfälschen.
Die radiale Homogenität kann zum Beispiel durch ein eingefangenes Magnetfeld so gestört werden, daß das radiale Dichte- und Temperaturprofil eine mehr oder weniger ausgeprägte Vertiefung in der Mitte der Entladung aufweist/14/.

Um hieraus eventuell entstehende systematische Fehler zu vermeiden haben wir das radiale Elektronendichte und Temperaturprofil an acht Positionen als Funktion der Zeit bestimmt. Axiale Homogenität haben wir nur dann angenommen, wenn die gleichzeitig side-on und end-on gemessenen Zeitverläufe von Spektrallinien aus gleicher Ionisationsstufe übereinstimmten.

Dieser Vergleich ist auch in anderer Hinsicht nützlich.
Da spektrale Linienintensitäten aus optisch dünnen Plasmen

stets entlang der Sichtlinie aufintegriert werden, bewirken effektive Längenänderungen des Plasmas Veränderungen im Zeitverlauf der Spektrallinien. Die simultane side-on und end-on Messung hilft deshalb auch radiale und axiale Änderungen der Plasmalänge, durch Kompression zum Beispiel, zu entdecken bzw. auszuschließen. Ein Beispiel bei dem diese Voraussetzungen nicht erfüllt sind wird in Kap. 3.3 diskutiert.

Wir haben bei den für unsere Messungen geeigneten Entladungsbedingungen sowohl side-on als auch end-on gemessen und die Länge sowie den Durchmesser des Plasmas als Funktion der Zeit bestimmt. Dieses Vorgehen ermöglicht es, eventuell vorhandene geringfügige Längenänderungen in den numerischen Anpassprozeß für die spektralen Zeitverläufe mit einzubeziehen.

Aus einem weiteren Grund ist die Lichtstreumethode anderen Verfahren zur Bestimmung der Elektronendichte und Temperatur vorzuziehen. Man erhält nämlich die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der Elektronen direkt aus dem Streuspektrum (vgl. Kap. 2.3). Im allgemeinen erwartet man eine Maxwell-Verteilung, da Elektron-Elektron-Stöße mit Stoßzeiten nach Spitzer im Nanosekundenbereich /15/ sowie eventuell auftretende schnell anwachsende Instabilitäten eine schnelle Thermalisierung bewirken sollten.

Dennoch wurden von einigen Autoren in jüngster Zeit nicht-Maxwellsche Verteilungsfunktionen beobachtet. Diese werden erklärt durch die Diffusion schneller Elektronen aus dem heißen Plasma an der Rückseite der Stoßwelle /16/, durch Plasmaturbulenzen /17/ und durch Ionisationsprozesse im Plasma /18/.

Da sich der Ratenkoeffizient nach Gl. ( 2 ) als Mittelung über die Elektronengeschwindigkeitsverteilungsfunktion ergibt, müssen solche Abweichungen, falls vorhanden, beim Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit theoretischen Werten für die Stoßquerschnitte $\sigma$ berücksichtigt werden.

## 2.2 Der Theta-Pinch

### 2.2.1 Grundlagen

Zur Erzeugung des benötigten heißen Plasmas wurde eine Theta-Pinch Anlage aufgebaut. Sie besteht im wesentlichen aus drei Kondensatorbatterien, die nacheinander durch eine einwindige Spule entladen werden. Der schnelle Stromanstieg in der Spule bewirkt ein ebenso schnell ansteigendes axiales Magnetfeld innerhalb der Spule. Hier befindet sich ein Entladungsgefäß aus Glas, das für die hier beschriebenen Messungen Wasserstoffgas bei Fülldrucken von 20 mTorr und 12 mTorr enthielt.

Ist das Füllgas vorionisiert, so induziert das schnell ansteigende Magnetfeld einen azimuthalen Strom $j_\Theta$ in der Grenzschicht zwischen Magnetfeld und vorionisiertem Plasma. Dieser ist dem Strom in der Spule gemäß der Lenz'schen Regel entgegengerichtet (vgl. Abb. 1).

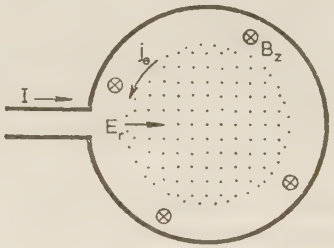



Abb. 1

Axiales Magnetfeld und azimuthaler Strom bewirken eine j x B Kraft, die das Plasma so weit komprimiert bis der kinetische Druck des Plasmas und der magnetische Druck eines eventuell eingefangenen Magnetfeldes $B_i$ dem äußeren Magnetfelddruck das

Gleichgewicht halten.

$$\frac{B_a^2}{2\mu_o} = N_e kT_e + N_i kT_i + \frac{B_i^2}{2\mu_o} \qquad (9)$$

Ist die Anstiegszeit des Magnetfeldes kurz genug, so daß sich die vom Magnetfeld verursachte Druckstörung schneller ausbreitet als eine magnetoakustische Welle, so kommt es zur Ausbildung einer Stoßwelle, die das Plasma irreversibel aufheizt.

Da für unsere Messungen nur das entstehende heiße Plasma wichtig ist, soll hier auf weitere Details des Implosions- und Aufheizungsvorgangs verzichtet werden. Diese können zum Beispiel in den Arbeiten von Commisso /19/ oder Höthker /20/ nachgelesen werden.

Die Lebensdauer des Plasmas wird begrenzt durch Instabilitäten, Endverluste und schließlich das Verschwinden des äußeren Magnetfeldes. Endverluste und der Einfluß makroskopischer Instabilitäten können durch ein schwaches, langsam veränderliches Magnetfeld (Bias-Feld) verringert werden, welches dem Hauptfeld antiparallel überlagert wird /21/.

Das Bias-Feld ermöglicht eine geschlossene Magnetfeldkonfiguration innerhalb der Spule und schränkt das freie Ausströmen des Plasmas zu den Enden hin ein (vgl. Abb. 2). Diese Konfiguration ist so stabil, daß sie, bei leicht modifizierten Strom- und Feldverteilungen, neuerdings wieder unter den verschiedensten Bezeichnungen (reversed-field-pinch, spheromak, compact toroid) für fusionsrelevante Experimente zur Diskussion steht /22,23/.

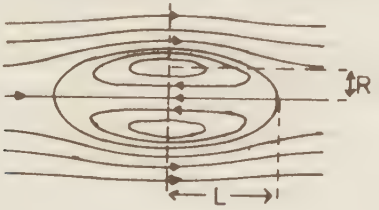



Abb. 2

Es bleibt zu prüfen, ob diese Plasmakonfiguration die Ionenverteilung beeinflußt. Hierzu vergleichen wir die Gyrationsfrequenzen für die Ionen

$$\nu_g = 1{,}54\ 10^3\ Z \cdot B\ /\ A_r \quad s^{-1} \qquad (10)$$

$A_r$: relative Atommasse ; B: Magnetfeld in Gauss

mit typischen Stoßfrequenzen zwischen Wasserstoffionen (f) und Ionen der Ladung Z. Nach Spitzer /15/ ist die Stoßzeit für einen mittleren $90^\circ$ - Stoß im Magnetfeld

$$t_s = v^3/(A_D(\Phi - G)) \quad \text{mit } A_D = 8\pi e^4 \cdot Z^2 \cdot Z_f^2 \cdot \ln\Lambda\ /(m^2 \cdot n_f)$$

Legt man eine Teilchendichte $n_f$ von $10^{16}$ $cm^{-3}$ zugrunde und nimmt man den Coulomblogarithmus $\ln\Lambda$ mit 14 sowie die Differenz $\Phi - G$ mit 0,86 an, so ergibt sich

$$t_s = 2{,}74\ 10^{-5} \sqrt{kT_i}^3 \cdot \sqrt{A_r}\ /\ Z^2 \quad \mu s \qquad (11)$$

mit $kT_i$ in eV.

Somit gilt:

$$t_s/t_g = 4{,}21 \cdot 10^{-8} \sqrt{kT_i}^3 \cdot B\ /\ (Z \cdot \sqrt{A_r}) \qquad (12)$$

Ist dieses Verhältnis groß gegen eins, so sind die Ionen entlang der Magnetfeldlinien eingefroren.

Für unsere Anlage kann dieses Verhältnis im ungünstigsten Fall, d.h. für leichte($A_r$=12), heiße ($kT_i$=1000eV), niedrig geladene (Z =5) Ionen in starkem Magnetfeld (B=35kG), den Wert 3 erreichen. Gleichzeitig sind für diesen Fall die typischen Zeitkonstanten sehr niedrig ($t_s$=0,188 µs und $t_g$= 0,045 µs).

In der µs - Skala auf der das Experiment abläuft wird die Ionenverteilung also nicht durch die Magnetfeldkonfiguration beeinflußt.

## 2.2.2 Experimenteller Aufbau

Ein Prinzipschaltbild der Theta-Pinch Anlage zeigt Abb. 3 . Die drei Kondensatorbatterien für das Bias-Feld, die Vorheizung und die Hauptentladung werden über Vorwiderstände und Hochspannungsschalter aufgeladen und über Funkenstrecken entladen. Die elektrischen Daten der einzelnen Entladungskreise sind in Tabelle 1 zusammengefaßt.

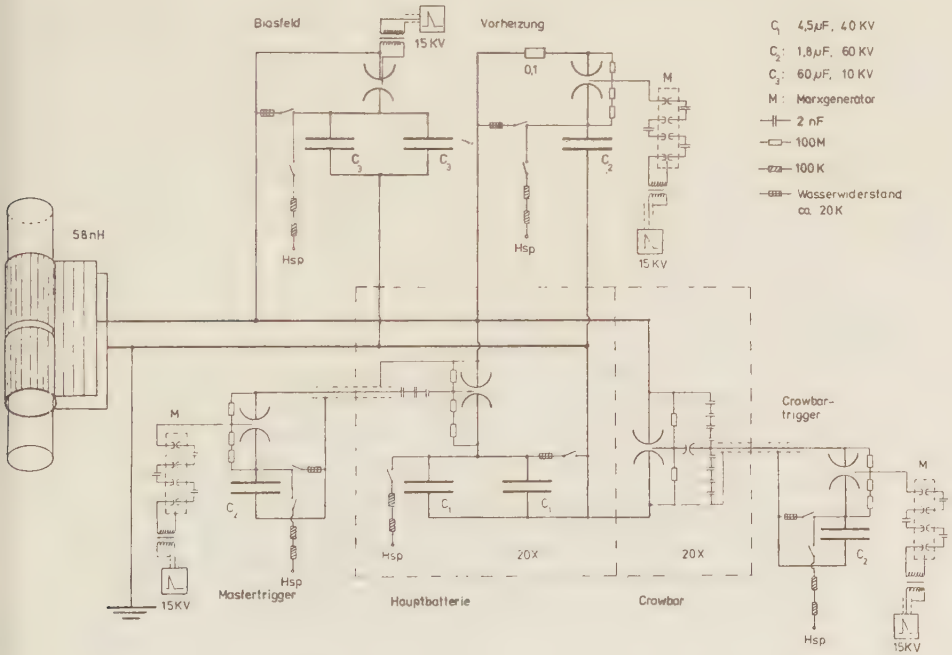



Abb. 3

| | Bias-Feld | Vorheizung | Hauptbatterie |
|---|---|---|---|
| C (μF) | 120 | 2 | 180 |
| $U_{max}$(kV) | 10 | 50 | 40 |
| $E_{max}$(kJ) | 6 | 3,6 | 144 |
| $L_{ges}$(nH) | 6000 | 420 | 75 |
| $I_{max}$(kA) | 45 | 131 | 1960 |
| $B_{max}$( T) | 0,08 | 0,2 | 3,4 |
| T/4 (μs) | 42 | 1,45 | 5,75 |
| Spule: | Ø = 21 cm ; l = 60 cm ; L = 60 nH | | |

Tab. 1

Zur Verringerung der Gesamtinduktivität besteht die Hauptbatterie aus zwanzig parallel geschalteten Einheiten mit je zwei Kondensatoren von 4,5 μF/40 kV, einer Last- und einer Crowbar-Funkenstrecke. Um diese jeweils zwanzig Funkenstrecken simultan schalten zu können, werden Triggerkondensatoren (Mastertrigger) auf 46 kV aufgeladen und über eine Spannungsverdopplerschaltung auf die Triggerelektroden der Funkenstrecken geschaltet. Die Triggerpulse für die Crowbar-Schalter werden über Hilfsfunkenstrecken aufgesteilt, da sie zum Zeitpunkt des Spannungsminimums schalten müssen.

Nicht eingezeichnet ist die Hochfrequenzentladung, die die ersten Ladungsträger erzeugt. Sie wird über zwei ringförmige Kupferelektroden eingekoppelt, die zu beiden Seiten der Spule auf das Entladungsgefäß aufgeklebt sind.

Der zeitliche Stromverlauf der einzelnen Entladungskreise ist -nicht maßstabsgetreu- in Abb. 4 skizziert.

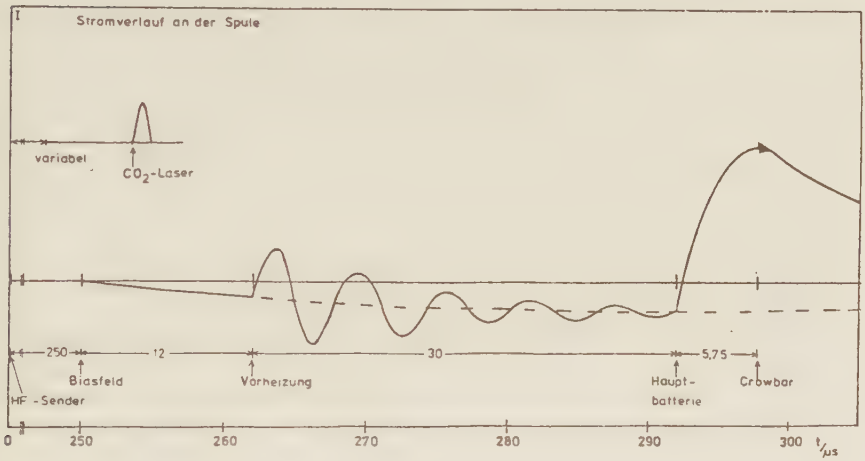



Abb. 4

Zur Kontrolle der einzelnen Entladungsvorgänge durch die Spule liegt eine acht Meter lange Rogowski-Spule um eine der Kollektorplatten. Sie liefert das entsprechende Signal der zeitlichen Ableitung des Stromverlaufs ( dI/dt - Signal ), welches dann durch ein RC- Glied aufintegriert werden kann.

Ein niederinduktiver 0,1 Ω Widerstand aus Manganin beschleunigt das Abklingen der Vorheizentladung, damit die Hauptentladung kein Restfeld einfangen kann. Die Verzögerungszeiten sind so abgestimmt, daß die Hauptentladung zum Zeitpunkt des maximalen antiparallel überlagerten Magnetfeldes gezündet wird. Die Crowbar-Schaltung, die den Strom der Hauptentladung durch die Spule zum Zeitpunkt des Maximalwertes kurzschließt, ermöglicht eine Verlängerung der Lebensdauer des Plasmas über die Viertelperiode der Entladung hinaus. Das Ausbilden einer gedämpften Schwingung wird verhindert und der Strom klingt nach dem Erreichen seines Maximalwerts exponentiell mit einer 1/e - Zeit von 17 μs ab.

Durch Variation des Füllgases, des Fülldruckes und der verschiedenen Ladespannungen kann man unterschiedliche Plasmabedingungen realisieren. Für die hier beschriebenen Messungen wurden diese Parameter so abgestimmt, daß ein möglichst homogenes, langlebiges Plasma entstand.

## 2.3 Die Lichtstreuung

### 2.3.1 Grundlagen

Zur Bestimmung der Elektronendichte und Temperatur benutzten wir, wie schon erwähnt, die 90° Thomson-Streuung. Dieses Verfahren ist schon in mehreren Arbeiten ausführlich sowohl theoretisch als auch experimentell beschrieben /24,25/. Deshalb sollen hier nur die im Rahmen dieser Arbeit wichtigen Details zusammengestellt werden.

Die Intensität des von freien Elektronen gestreuten Lichts ist im allgemeinen eine Funktion des differentiellen Wirkungsquerschnitts $\sigma_T$, des Streuvektors $\underline{k}$ und der Frequenz

$$\sigma = \sigma_T \, S(k,\omega) \qquad (13)$$

Hierbei ist $\sigma_T = r_o^2 \sin^2\vartheta$ (14)

der klassische Streuquerschnitt für die Streuung an einem einzelnen Elektron, $r_o$ der klassische Elektronenradius und $\vartheta$ der Winkel zwischen der Richtung des elektrischen Feldvektors und der Beobachtungsrichtung.

Die Streufunktion $S(k,\omega)$ enthält alle wesentlichen Informationen, sowohl über die Elektronenverteilungsfunktion als auch über die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Plasma. Wichtig ist die Wahl des Streuvektors $\underline{k}$ im Verhältnis zur Debyelänge des Plasmas $\lambda_D$. Der Streuvektor ergibt sich als Differenz der Wellenvektoren der einfallenden Welle $\underline{k}_o$ und der gestreuten Welle $\underline{k}_s$.

$$\underline{k} = \underline{k}_o - \underline{k}_s \simeq (4\pi \sin\tfrac{\theta}{2})/\lambda_o \qquad (15)$$

$\lambda_o$ ist die Wellenlänge des zur Streuung benutzten Lichts und $\theta$ der Streuwinkel, d.h. der Winkel zwischen der Richtung

der einfallenden Welle und der Beobachtungsrichtung.

Wir benutzten einen Rubin-Laser ( $\lambda$ = 694,3 nm) und beobachteten unter $\theta = 90^{\circ}$, so daß $1/k = 7{,}8 \cdot 10^{-6}$ cm.
Auf der anderen Seite beträgt die Debye-Länge eines Plasmas

$$\lambda_D = (kT_e)/(4\pi N_e e^2) = 743 \cdot (kT_e/eV)/(N_e/cm^{-3}) \text{ cm} \quad (16)$$

Bei $kT_e$ = 200 eV und $N_e = 2 \cdot 10^{16} cm^{-3}$ wird $\lambda_D = 7{,}4 \cdot 10^{-5}$ cm.
Damit wird der Streuparameter

$$\alpha = 1/(k \cdot \lambda_D) = 0{,}1 \quad (17)$$

Da die Lichtstreuung stets an Elektronendichtefluktuationen geschieht, spiegelt die Streufunktion in diesem Fall $\alpha < 1$ die Elektronendichtefluktuationen innerhalb der Debye-Kugel wider. Hier sind die Elektronen unkorreliert und die Streuung ist daher als inkohärent zu betrachten. Das Streuspektrum $S(k,\omega)$ ergibt sich für diesen Fall aus der Geschwindigkeitsverteilungsfunktion der Elektronen, da sowohl die einfallende Strahlung im Ruhesystem der Elektronen, als auch die reemittierte Strahlung im Laborsystem des Beobachters eine Dopplerverschiebung erfahren.
Insgesamt ergibt sich

$$\Delta\omega = \underline{k} \cdot \underline{v} \quad (18)$$

Gehorcht die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen einer Maxwell-Verteilung, so stellt sich das Streuspektrum als ein Gaußprofil mit der Halbwertsbreite

$$\Delta\lambda_{1/2} = 4\lambda_o \cdot \sin\frac{\theta}{2} \cdot \sqrt{(2\, kT_e \cdot \ln 2)/(m_e c^2)} \quad \text{dar.} \quad (19)$$

Die Elektronentemperatur des Plasmas läßt sich dann aus der Halbwertsbreite des Streuspektrums bestimmen.

Andererseits ist die spektral integrierte Intensität des Streulichts proportional zur Elektronendichte des Plasmas. Die Kalibrierung der Nachweisapparatur zur Bestimmung der Absolutintensität des gestreuten Lichts geschieht "in situ" und beruht auf der Tatsache, daß die Streucharakteristik für Thomson-Streuung die gleiche ist wie für Rayleigh-Streuung. Wir benutzten zur Kalibrierung des Nachweissystems Stickstoff-Gas, dessen Streuquerschnitt 380 mal kleiner ist als der Thomsonstreuquerschnitt /24/.

### 2.3.2 Experimenteller Aufbau

Abbildung 5 zeigt schematisch den experimentellen Aufbau des Lichtstreusystems. Er entspricht im wesentlichen dem von Maurmann /26/ verwendeten und beschriebenen Aufbau.

Bei zu erwartenden Elektronentemperaturen von 200 - 300 eV sind die Streulichtspektren mehrere hundert Angström breit. Um diesen spektralen Bereich bei einer Entladung erfaßen zu können, installierten wir am Austrittsspalt des 0,5 m Monochromators ein Spaltsystem aus zwanzig jeweils einen Millimeter breiten Glasfaserspalten. Bei einer reziproken Dispersion des Monochromators von 33 Å/mm überdeckte dieses Spaltsystem einen Bereich von 660 Å. Die Intensität von sieben ausgewählten Kanälen wird durch Photomultiplier des Typs RCA 7265 nachgewiesen.

Die Breite der Streuspektren in Zusammenhang mit der, bei Elektronendichten von $10^{16} cm^{-3}$, relativ großen Streulichtintensität gestattete es auf ein aufwendiges Blendensystem zur Falschlichtunterdrückung zu verzichten. Es reduzierte sich auf jeweils drei Blenden, die in den Endflanschen des Entladungsgefäßes untergebracht sind.

Ansonsten reduzierten ein Lichtsumpf am Austrittsfenster des Laserstrahls und eine Filterkombination vor dem Nachweissystem den Falschlichtpegel in genügendem Maße.

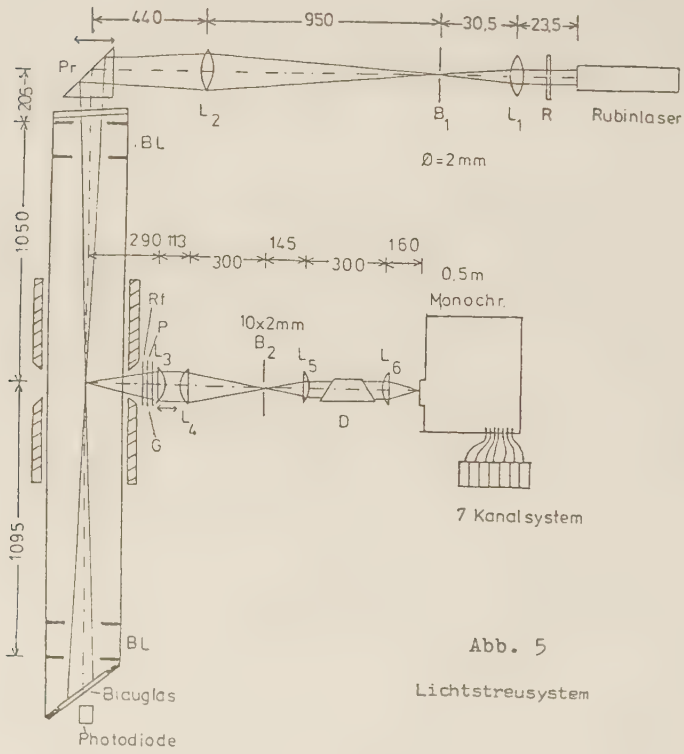



Abb. 5

Lichtstreusystem

Mit Hilfe des beschriebenen Streulichtsystems war es möglich, die Plasmaparameter als Funktion der Zeit und des Radius in der Mitte des Entladungsgefäßes zu bestimmen. Das räumliche Auflösungsvermögen wurde begrenzt durch den Brennfleckdurchmesser des Lasers im Plasma von ca. 4 mm .

Die Aufheizung des Plasmas durch den stark fokussierten Laser kann für unsere Bedingungen gemäß den Abschätzungen von de Silva und Goldenbaum /25/ vernachlässigt werden. Auch die Beeinflußung des Streulichtspektrums durch das Magnetfeld der Entladung ist vernachlässigbar, da gilt:

$$\Omega_e \ll \omega_o \qquad /27/.$$

Allerdings müssen bei der Auswertung Korrekturen auf Grund relativistischer Effekte berücksicht werden. Diese wurden gemäß dem von Sheffield /28/ angegebenen Verfahren durchgeführt.

## 2.4 Die Spektroskopie

### 2.4.1 Grundlagen

Die spektroskopischen Messungen hatten drei Schwerpunkte:

1. die Bestimmung von Zeitverläufen von Spektrallinien der untersuchten Ionen
2. die Bestimmung der Ionentemperatur
3. die Beobachtung der Kontinuumsstrahlung

Sei $\epsilon$ der lokale Emissionskoeffizient einer Spektrallinie, so erhält man im optisch dünnen Fall die beobachtete Intensität durch Integration entlang der Sichtlinie

$$I(W \cdot cm^{-2} \cdot sr^{-1}) = \int_0^R \epsilon_{pq}(r,t)\, dr = \frac{h\nu}{4\pi} A_{pq} \int_0^R N_j(p,r,t)\, dr \qquad (20)$$

Für ein homogenes Plasma der Länge L reduziert sich Gl. 20 zu

$$I = \frac{h\nu}{4\pi} \cdot A_{pq} \cdot N_j(p,t)\, L \qquad (21)$$

A priori spiegelt der Intensitätsverlauf einer Spektrallinie also den Zeitverlauf der Besetzungsdichte $N_j(p,t)$ des oberen Niveaus p wieder. Es bedarf eines plasmaphysikalischen Modells, um diese Größe mit anderen Parametern, z.B. der Besetzungsdichte im Grundzustand einer Ionisationsstufe $N_j(g,t)$ zu verknüpfen.

Für unser Plasma gilt im wesentlichen das Korona-Modell. Es geht davon aus, daß die angeregten Zustände einer Ionisationsstufe hauptsächlich durch Elektronenstöße vom Grundzustand aus bevölkert werden. Für die Entvölkerung dominiert die spontane Emission, so daß sich folgende Gleichgewichtsbeziehung ergibt:

$$N_e \cdot X_j(g,p) \cdot N_j(g) = N_j(p) \cdot \sum_{q<p} A_{pq} \qquad (22)$$

Dieses Modell ist gültig, solange die Strahlungsübergangswahrscheinlichkeiten $A_{pq}$ groß sind gegenüber den Übergangswahrscheinlichkeiten durch Stöße $N_j(p) \sum_q X_j(p,q)$.

Die Zeitkonstante zur Erreichung des Gleichgewichts nach Gl. 22 wird durch die Lebensdauer $\tau$

$$\tau = \left( \sum_{q<p} A_{pq} \right)^{-1} \qquad (23)$$

des oberen Niveaus bestimmt. Sie liegt für Resonanzübergänge hoch ionisierter Atome in der Größenordnung $10^{-11}$s. Bei Elektronendichten von $10^{16}$ cm$^{-3}$ liegen die Stoßübergangswahrscheinlichkeiten für die betreffenden Niveaus hingegen bei $10^9$ s$^{-1}$, so daß die spontane Emission in diesem Fall der wesentliche Entvölkerungsprozeß ist.

Außerdem kann man auf Grund der angegebenen Zeitkonstanten davon ausgehen, daß sich die Ionen eines Ladungszustandes zum überwiegenden Teil im Grundzustand befinden. Zusammengefaßt ergeben Gl. 21 und 22 also:

$$I(t) = \frac{h\nu}{4\pi} \left( A_{pq} / \sum_{r<p} A_{pr} \right) \cdot X_j(g,p) \cdot N_e(t) \cdot N_j(g,t)\, L(t) \qquad (24)$$

Unter Berücksichtigung der Abhängigkeiten $X_j(T_e(t))$, $N_e(t)$ und $L(t)$ repräsentiert die Intensität einer Spektrallinie im Korona-Modell also genau die zeitliche Entwicklung des Grundzustandes der entsprechenden Ionisationsstufe.

Mit steigender Hauptquantenzahl n nehmen die Strahlungsübergangswahrscheinlichkeiten ab, die Stoßraten zwischen benachbarten Zuständen hingegen zu. Deshalb werden die Besetzungsdichten hochangeregter Niveaus in zunehmendem Maße durch Stoßprozeße bestimmt und das Korona-Modell gilt nicht mehr für Übergänge zwischen hochangeregten Zuständen. Ab einer gewissen Hauptquantenzahl $n_o$, die von den Plasmaparametern abhängt, befinden sich die Besetzungszustände untereinander und mit dem

Grundzustand der nächst höheren Ionisationsstufe im partiellen thermodynamischen Gleichgewicht (PLTE) /29/:

$$n_o^{17/2} = 5{,}15 \cdot 10^{17} \cdot z^6 \cdot (N_e/cm^{-3})^{-1} \cdot (kT_e/eV)^{1/2} \qquad (25)$$

Experimentell ist diese statistische Besetzung hoch angeregter Niveaus jedoch nicht immer zu verifizieren /30/.

Es bleibt die Tatsache, daß der Zeitverlauf entsprechender Spektrallinien in der Regel weder dem Zeitverlauf der Resonazlinie aus gleichem Ladungszustand noch dem derjenigen aus dem nächst höheren Ionisationszustand entspricht. Abb.6 zeigt zur Illustration den Vergleich des n=7-6 Übergangs von C V bei 4944 Å mit den C V und C VI Resonanzlinien.

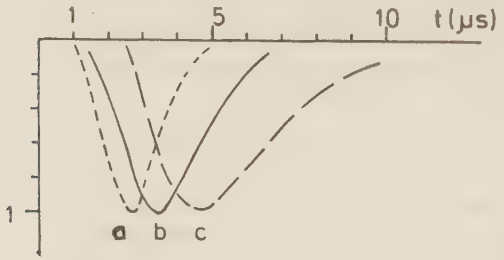



Abb. 6

a: C V Resonanzlinie
b: C V n = 7 - 6
c: C VI Resonanzlinie

Eine andere Einschränkung des Korona-Modells muß man bei metastabilen Energieniveaus machen. Da von diesen Niveaus aus keine Dipolübergänge erlaubt sind, werden zwangsläufig die stoßbestimmten Entvölkerungsprozeße dominierend. Sind nun auch die Bevölkerungsprozeße stoßbestimmt und sind die Stoßzeiten klein gegenüber der Lebensdauer des Plasmas, so stellt sich für die Besetzungsdichten ein statistisches Gleichgewicht mit den energetisch nahegelegenen Zuständen ein.

Aus der Linienintensität dipolverbotener Linien von metastabilen Niveaus nahe des Grundzustandes einer Ionisationsstufe kann man daher die absolute Konzentration hochionisierter Atome in einem Plasma bestimmen /31/.

2.4.2 Bestimmung der Ionentemperatur

Die Bestimmung der Ionentemperatur aus der Dopplerverbreiterung geeigneter Spektrallinien ist ein gängiges Verfahren und soll daher hier nicht weiter abgehandelt werden.

Es gilt (vgl. Wiese /32/):

$$kT_i/eV = 1{,}68 \cdot 10^8 \cdot A_r \, (\Delta\lambda_{1/2}/\lambda)^2 \qquad (26)$$

$\Delta\lambda_{1/2}$ : volle Halbwertsbreite; $A_r$: rel. Massenzahl

Selbstverständlich ist darauf zu achten, daß der Dopplereffekt der dominierende Verbreiterungsmechanismus der ausgewählten Spektrallinie ist.

Wir benutzten für frühe Zeiten die C V Linie bei 2271 Å. Die Starkverbreiterung ist für diese Linie bei Elektronendichten von $10^{16}$ $cm^{-3}$ zu vernachlässigen /33/. Für spätere Zeiten, wenn C V schon wegionisiert ist, versuchten wir noch eine Messung mit den C VI Linien bei 3434 Å (n=7-6) und 5290 Å (n=8-7) /34/. Die letztere war jedoch so intensitätsschwach, daß eine Auswertung nicht sinnvoll erschien.

Da die Starkverbreiterung proportional $n^2$ ist, schätzen wir sie für den Fall n = 7 kurz ab. Nach Rechnungen von Griem und Shen /35/ liefert die quasistatische Verbreiterung durch die Ionen für unsere Plasmabedingungen den Hauptbeitrag. Diesen berechnen wir nach einer Formel von Poquerusse /36/:

$$\Delta\lambda_s / \lambda = 6{,}8 \cdot 10^{-5} \cdot n^2(n-1)^2 \cdot Z^{-3} \cdot (N_e/10^{18}cm^{-3})^{2/3} \qquad (27)$$

n: Hauptquantenzahl des oberen Niveaus

Für $N_e = 3 \cdot 10^{16} cm^{-3}$, Z = 6, n = 7 und $\lambda$ = 3434 Å ergibt sich die halbe Halbwertsbreite zu $\Delta\lambda_s$ = 0,18 Å.

Bei Dopplerbreiten von 1 Å ergibt dies nach den Tabellen von Davies und Vaughan /37/ eine Korrektur von 10%. Die Berücksichtigung dieser Korrektur und der Verbreiterung durch die Nachweisapparatur geschieht nach bekannten Methoden, die schon früher beschrieben wurden /38/.

### 2.4.3 Optische Tiefe

Im Abschnitt 2.4.1 hatten wir gesehen, daß zur Bestimmung der Zeitverläufe einzelner Ladungszustände möglichst Resonanzlinien oder Linien von niedrig gelegenen Energieniveaus in Frage kommen. Für solche Übergänge kann jedoch die optische Tiefe des Plasmas eine Rolle spielen.
Nach Griem /29/ gilt für die Mitte einer dopplerverbreiterten Linie:

$$\tau_d = 3{,}0 \cdot 10^{-9} \cdot (A_r E_H / kT_i)^{1/2} \cdot f \cdot N_j(u) \cdot \lambda \cdot L \qquad (28)$$

Hierbei ist f die Oszillatorenstärke und $N_j(u)$ die Besetzungsdichte des unteren Niveaus.

Nach dieser Abschätzung haben die 2s - 2p Resonanzlinien lithiumähnlicher Ionen die größte optische Tiefe. Es erschien uns daher ratsam, eventuelle Einflüße der optischen Tiefe auf die Linienform experimentell zu überprüfen. Zwei Möglichkeiten boten sich an. Zum einen die Variation der Verunreinigungskonzentration, zum anderen der Vergleich mit anderen, nicht resonanten Linien aus der gleichen Ionisationsstufe. Wir überprüften beides.

Gerade bei lithiumähnlichen Ionen bietet sich die 3s - 3p Linie für side-on Vergleichsmessungen an, da sie oft noch im sichtbaren Spektralbereich oder im nahen UV liegt. Sie zeigte in allen Fällen den gleichen Zeitverlauf wie die 2s - 2p Resonanzlinie. Beide änderten sich nicht, wenn die Konzentration der Verunreinigungsatome von 1 % auf 3 % angehoben wurde.

Eine Beeinflußung der Linienverläufe durch die optische Tiefe des Plasmas schlossen wir daher aus.

### 2.4.4 Experimenteller Aufbau

Für die spektroskopischen Messungen standen sieben Monochromatoren zur Verfügung, die den Spektralbereich von 20 Å bis 10.000 Å abdeckten (vgl. Abb. 7). Die beiden Vakuum-UV Monochromatoren sind end-on über Tombakschläuche vakuumdicht an das Entladungsgefäß angeflanscht. Die Höhe der Ein- und Austrittsspalte betrug jeweils 4 mm. Geeignete Blenden in den Flanschen beschränkten das Beobachtungsvolumen auf 1,5 cm Durchmesser in Spulenmitte. Bei Spaltbreiten von 20 bis 100 µm und Fülldrucken von maximal 20 mTorr im Entladungsgefäß waren differentielle Pumpstrecken nicht nötig.

Beide VUV-Monochromatoren hatten konkave Gitter mit jeweils 1200 Strichen/mm. Als Nachweissystem dienten p-Terphenyl-Szintillatoren in Kombination mit Photomultipliern von Typ RCA 1P28.

Der 0,5 m Monochromator side-on mit dem 7-Kanal Glasfaser-Photomultipliersystem für die Lichtstreuung (vgl. Abschn.2.3.2) diente außerdem der Beobachtung von Linien- und Kontinuumsstrahlung im sichtbaren Spektralbereich.

Ein fest unterhalb der Entladungsspule installierter 0,25 m Monochromator mit zwei Gittern (2400 Str./mm, blaze 3000 Å und 1200 Str./mm, blaze 5000 Å) wurde zu Monitorzwecken für die Entladung benutzt. Dies geschah wahlweise mit der C V Linie bei 2271 Å oder mit der Kontinuumsstrahlung bei 5226 Å. Dieser Spektralbereich zeichnet sich dadurch aus, daß in ihm keine Linienstrahlung von gängigen Verunreinigungsatomen oder Ionen zu erwarten ist.

Ein weiterer 0,25 m Monochromator und ein 1 m Monochromator konnten wahlweise side-on oder end-on benutzt werden. Für den Gebrauch end-on waren die Balgrollenzugschieber, die das Entladungsgefäß vakuumdicht abschlossen, eigens mit zentrischen Quarzfenstern versehen ( $\varnothing = 30$ mm). Umlenkspiegel und Linsen geeigneter Brennweiten fokussierten die Strahlung aus der Spulenmitte auf die Eintrittsspalte der Monochromatoren.

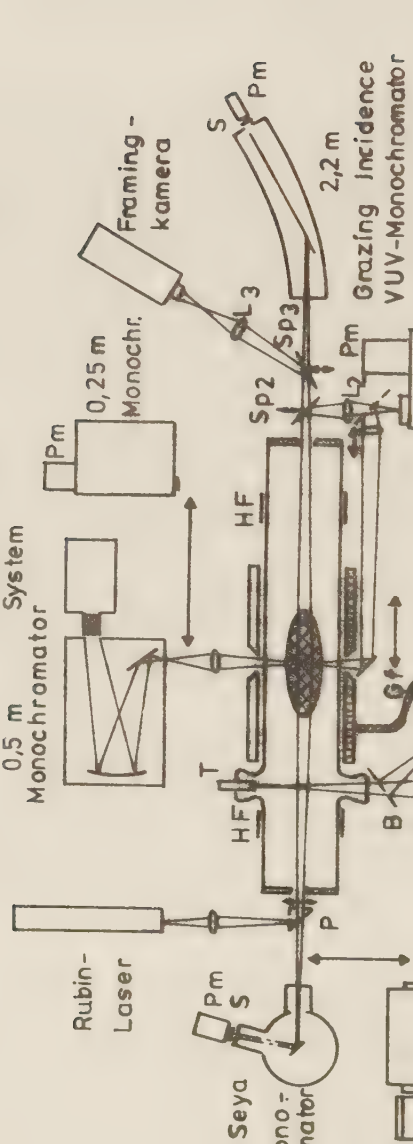

Framing-kamera
S
Pm
2,2 m
Grazing Incidence VUV-Monochromator
L3
Sp3
Sp2
L2
Pm
0,25 m Monochr.
Pm
7 Kanal-System
0,5 m Monochromator
HF
HF
T
Gf
Pd
B
L1
Pm
0,25m Monochrom.
1m Monochr.
Rubin-Laser
P
Pm
S
0,2m Seya VUV-Monochromator
Pm
0,25 m Monochromator
CO2 Laser
Pm: Photomultipler
S : Szintillator
T : Target
HF: Hochfrequenz
Gf: Glasfiber
Pd: Photon-Drag
B : Strahlteiler
P : Prisma

Abb. 7

Ein letzter 0,25 m Monochromator (Gitter 1200 Str./mm, blaze 5000 Å) war mit einem 0,5 m langen Querschnittswandler aus Quarzglasfasern versehen. Das 0,1 mm breite 10 mm hohe Ende des Faserbündels ersetzte den Eintrittsspalt des Monochromators. Das andere Ende hat einen Durchmesser von 1,1 mm.

Seitlich in der Entladungsspule befinden sich längst der Achse 60 Löcher in je 10 mm Abstand. Der Durchmesser dieser Löcher verengt sich stufenweise bis auf 1 mm am Innenrand der Spule. In diese Löcher wird das runde Ende des Querschnittswandlers gesteckt. So kann man ohne aufwendige Optik und ohne Justierprobleme spektroskopische Messungen entlang der z-Achse der Entladung durchführen, die allerdings oft durch die schlechte Lichtstärke des Nachweissystems erschwert werden.

Der Nachweis des spektral zerlegten Lichts geschieht in allen Fällen mit Photomultipliern des Typs RCA 1P28, deren Signale mit Zeitkonstanten von 50 ns integriert auf Oszillographen mit vorgesetzten Polaroidkameras nachgewiesen werden.

## 2.5 Das Injektionssystem

Um Atome von Festkörpern als Verunreinigungen in das Plasma einzubringen benutzten wir einen gepulsten $CO_2$-Laser mit instabilem Resonator, wie er erstmalig von Beaulieu /39/ beschrieben wurde. Ein Prinzipschaltbild der Entladungskreise des Lasers zeigt Abb. 8. Die charakteristischen Daten sind in Tab. 2 zusammengefaßt.

| Elektr. Kreis | Vorheizung | Hauptentladung |
|---|---|---|
| C (µF) | 0,2 | 2 x 0,2 |
| U (kV) | 50 | je 50 |
| E ( J) | 250 | 500 |
| Verzögerungszeit | 6 µs | |
| Elektrodenabstand | 6,1 cm | |
| - länge | 100 cm | |
| Resonatorlänge | 144 cm | |
| Resonatorspiegel | $M_1$ | $M_2$ |
| Reflexionsgrad | 98,5 % | 98,5 % |
| Durchmesser (mm) | 100 | 38 |
| Krümmungsradius (cm) | 500 | -250 |
| Brennweite (cm) | 250 | -125 |
| Gasgemisch : 88,4 % He , 4 % $CO_2$ und 7,6 % $N_2$ | | |
| Gesamtdruck | 1 bar | |
| Strahlungsenergie | 22 J | |
| Strahlungsleistung | 240 MW | |

Tab. 2

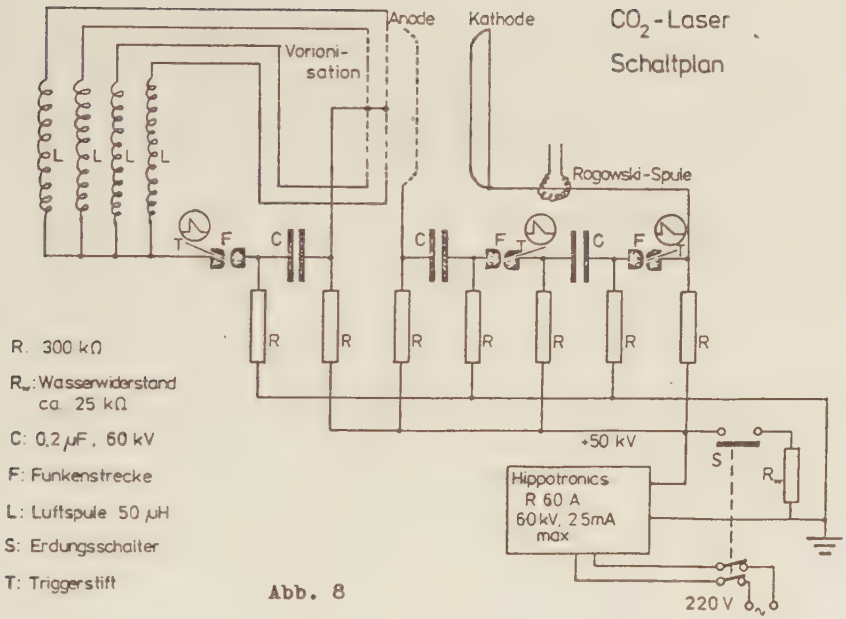



Abb. 8

Wie schon in Abb. 7 zu sehen war, sind an das Entladungsgefäß zwei einander gegenüberliegende Stutzen angeblasen, deren Achse 5,5 cm vom Ende der Spule entfernt lag. Durch den einen Stutzen ragte ein verschiebbarer Glasstab in das Entladungsgefäß, in dessen Ende das Target aus der zu untersuchenden Substanz eingeklebt war. Der andere Stutzen besaß ein vakuumdichtes NaCl - Fenster, durch das die $CO_2$ - Laserstrahlung bei 10,6 µm auf das unter $45^\circ$ angeschrägte Ende des Targets fokussiert werden konnte.

Den zeitlichen Verlauf des Laserpulses zeigt Abb. 9. Mylarfolien im Strahlengang zwischen dem Laser und der NaCl - Linse erlaubten eine stufenweise Reduzierung der Laserleistung am Target. Die maximale Leistungsdichte im Fokus betrug $2 \cdot 10^9$ W·cm$^{-2}$.

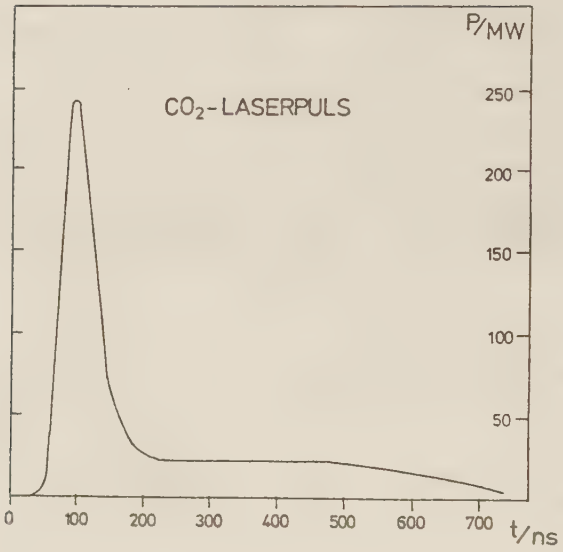



Abb. 9

Ein Strahlteiler vor dem Eintrittsfenster blendete 8 % der $CO_2$-Strahlung aus, die, abgeschwächt und durch einen Photon-Drag-Detektor nachgewiesen, als Monitor für die Laserleistung dienten.

Zu beliebigen Zeiten während des Entladungszyklus konnte so eine Wolke, bestehend aus Atomen und Ionen des Targetmaterials, in das Entladungsgefäß eingebracht werden und durch Drift und Diffusion in den Bereich unter die Entladungsspule gelangen.

Spektroskopische Untersuchungen an den ablatierten Fremdatomen und Ionen wurden in der Vorheizung von L. Ullrich /40/ und zu Beginn der Hauptentladung von J. Haumann /41/ durchgeführt. Sie hatten zum Ziel Bedingungen zu finden, unter denen diese Verunreinigungen möglichst homogen im Entladungsbereich verteilt waren.

Die weitestgehende Homogenität ablatierter Titanatome in der Vorheizung wird bei einer Zeitverzögerung von $\Delta t = 32\ \mu s$ erreicht. Das Vorheizplasma hatte bei einem Fülldruck von 12 mTorr Wasserstoff Elektronentemperaturen von 2 - 3 eV und Elektronendichten von einigen $10^{14}\ cm^{-3}$.

Spektroskopische Messungen an Hand geeigneter Spektrallinien zeigten die axiale Verteilung der ablatierten Verunreinigungen. Beispiele für den oben genannten Fall $\Delta t = 32\ \mu s$ sind in Abb. 10 dargestellt.

Für diese Bedingung konnte auch zu Beginn der Hauptentladung eine homogene Titanverteilung entlang der z - Achse beobachtet werden. Dies belegt Abb. 11 . Dort ist die relative Intensität der Ti IV Linie 5p - 5d bei 3576,4 Å als Funktion der Entfernung von der Spulenmitte aufgetragen.

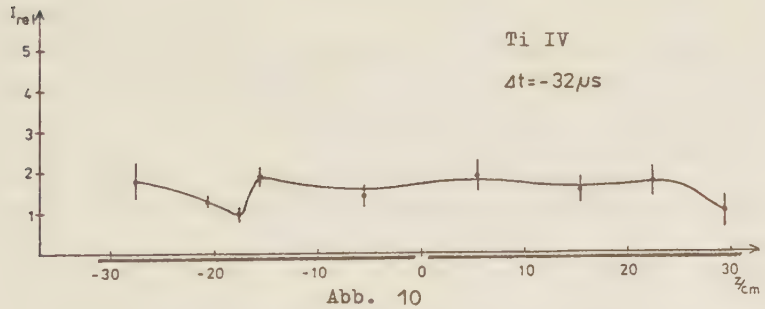



Abb. 10

Durch Diffusionsprozeße sank für diese langen Verzögerungszeiten $\Delta t$ leider auch die absolute Verunreinigungskonzentration im Entladungsvolumen beträchtlich ab. Dies führte zu einer Verminderung der beobachtbaren Linienintensitäten. Ein Beispiel ist in Abb. 12 dargestellt. Die relative Intensität der Ti X Linie 3p - 3d bei 289,58 Å hat ein Maximum bei einer Einschußzeit $\Delta t = 17\ \mu s$ vor der Vorheizentladung.

Die Driftgeschwindigkeit der ablatierten Atome und Ionen entlang der z - Achse stellte sich als unabhängig von der Laserleistung heraus und betrug 1,3 ± 0,2 cm/µs. Der entscheidende Parameter zur Erreichung axialer Homogenität war die Einschußzeit $\Delta t$ des $CO_2$ - Lasers vor Beginn der Vorheizentladung.

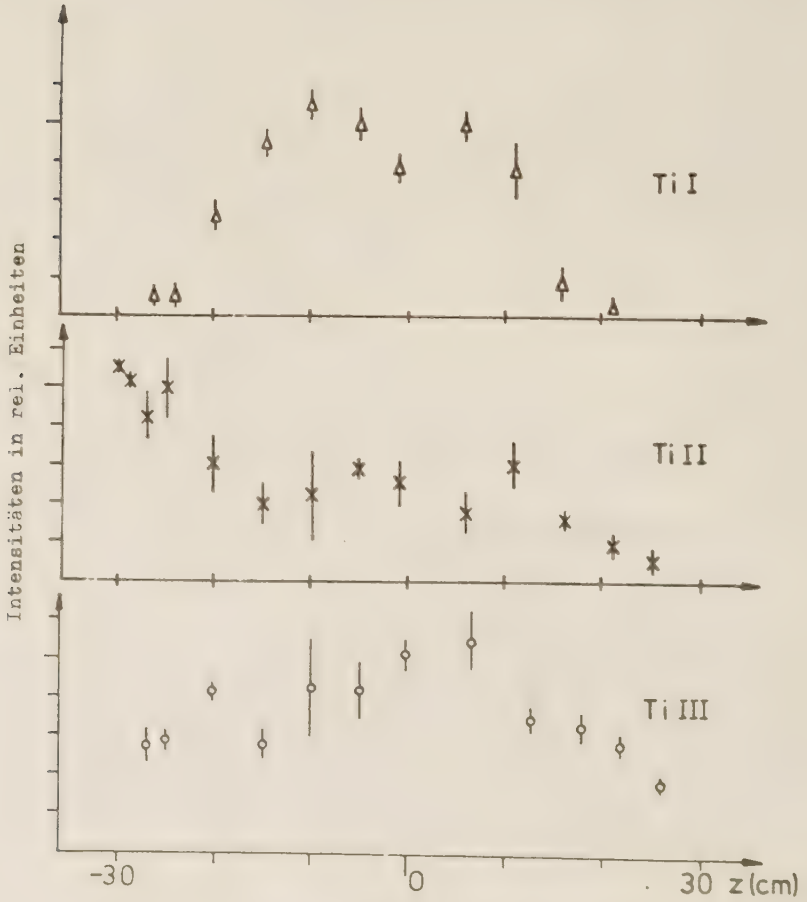
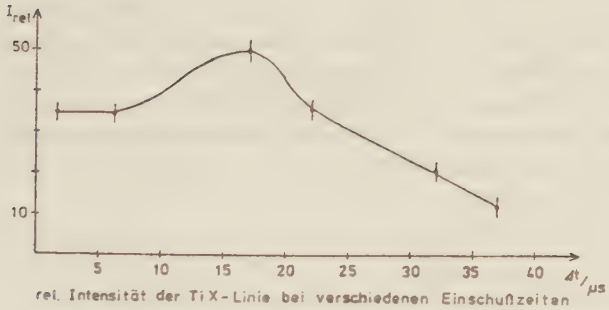



Abb. 11




rel. Intensität der Ti X-Linie bei verschiedenen Einschußzeiten

Abb. 12

Auch für diesen Fall ist die Titanverteilung zu Beginn der Hauptentladung noch einigermaßen homogen (vgl. Abb. 13 ). Um höhere Linienintensitäten zu erhalten, war es deshalb oft angebracht, die Verzögerungszeiten auf bis zu $\Delta t = 17$ µs zu verkürzen.

Andererseits bewirkten die einseitig eingeschoßenen Verunreinigungsatome eine makroskopische Drift des Plasmas entlang der z - Achse /42/, worauf in Kap. 4 noch ausführlich eingegangen wird. Die Driftgeschwindigkeit hängt dabei stark von der Verunreinigungskonzentration zu Beginn der Hauptentladung ab und war am größten für die Verzögerungszeit von $\Delta t = 17$ µs.

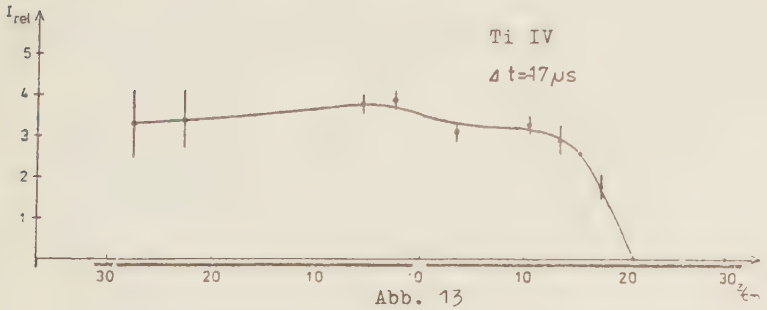



Abb. 13

Je höher die Driftgeschwindigkeit des Plasmas, desto kürzer war die für spektroskopische Zwecke nutzbare Lebensdauer des Plasmas. Bei der Wahl der Verzögerungszeit $\Delta t$ galt es deshalb immer einen Kompromiß zu finden zwischen den Intensitäten der zu beobachtenden Linien und der Gesamtlebensdauer des Plasmas, welche entscheidend war für die höchste erreichbare Ionisationsstufe.

Die Zeitverläufe der beobachteten Spektrallinien wurden durch die Wahl der Verzögerungszeit $\Delta t$ in den Grenzen von 17 - 32 µs nur unwesentlich beeinflußt. Dies läßt darauf schließen, daß die verschiedenen Konzentrationen und Driftgeschwindigkeiten des Plasmas die Plasmaparameter kaum beeinflußen. Die größte Korrektur ergab sich für end-on Messungen auf Grund der Längenänderung des Plasmas beim Ausströmen. Diese Korrektur ist jedoch leicht zu berücksichtigen und wird in Kap. 3.6 diskutiert.

## 3. MESSUNGEN

Wie in Kap. 2.1 schon erläutert erfordert die plasmaspektroskopische Methode ein axial und radial möglichst homogenes Plasma. Aus einer Vielzahl von Kombinationsmöglichkeiten zwischen Fülldruck und Entladespannungen erwiesen sich nur zwei Bedingungen als brauchbar, ein in diesem Sinne geeignetes Plasma herzustellen. Deren Parameter sind in Tabelle 3 zusammengestellt. Mit dem $CO_2$-Laser ablatierte Verunreinigungen kamen nur bei Bed. II zu Einsatz.

In beiden Fällen wurden die Plasmen gründlich diagnostiziert, bevor wir mit den spektroskopischen Messungen begannen. Die Ergebnisse finden sich in den Abschnitten 3.1 - 3.4 . Im Abschnitt 3.5 behandeln wir dann die spektroskopischen Messungen. Nach einem Abschnitt über die Probleme bei der Auswertung ( 3.6 ) sind dann die abgeleiteten Ratenkoeffizienten im letzten Abschnitt dieses Kapitels ( 3.7 ) tabellarisch zusammengestellt.

Die Zeitachse bezieht sich für alle Messungen auf den Einsatz der dI/dt - Signale, deren charakteristischer Verlauf in Abb. 14 dargestellt ist.

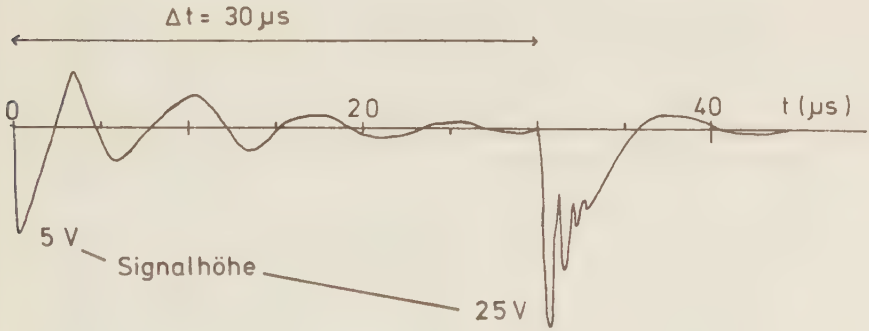



Abb. 14

| Bedingung | | I | II |
|---|---|---|---|
| Fülldruck $H_2$ (mTorr) | | 20 | 12 |
| Bias-Feld | U (kV) | 8 | 4 |
| | E (kJ) | 4 | 1 |
| | T/4 (µs) | 42 | 42 |
| Vor-heizung | U (kV) | 46 | 46 |
| | E (kJ) | 2 | 2 |
| | T/4 (µs) | 1,5 | 1,5 |
| Haupt-batterie | U (kV) | 35 | 35 |
| | E (kJ) | 55 | 110 |
| | T/4 (µs) | 4,5 | 5,7 |

Tab. 3 : benutzte Entladungsbedingungen

## 3.1 Framing- und Streakaufnahmen

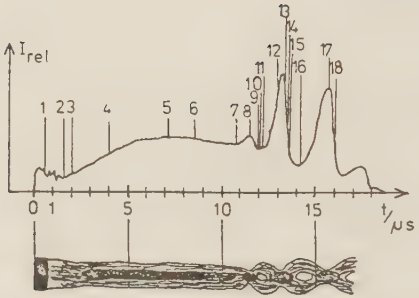
Um einen Überblick über das makroskopische Verhalten des Plasmas zu bekommen, machten wir Streakaufnahmen side-on und Framingaufnahmen end-on. Diese sollten auch dazu beitragen, die Ursache der Oszillationen auf dem Signal der Kontinuumsintensität zu klären. Hier hatte schon die Phasenverschiebung der Maxima bei side-on Beobachtung mit um $90^{\circ}$ gedrehter Blickrichtung die Vermutung einer Rotation der Plasmasäule nahegelegt.

Eine Zusammenfassung der Streak- und Framingaufnahmen ist in Abb. 15 zu sehen. Ferner ist zum Vergleich die Intensität der Kontinuumsstrahlung bei 5230 Å als Funktion der Zeit dargestellt. Die markierten Stellen beziehen sich auf die Zeitpunkte zu denen die Framingaufnahmen entstanden sind.

Da die Intensität der Kontinuumsstrahlung im wesentlichen proportional $N_e^2$ ist, kann man Abb. 15 a schon entnehmen, daß die Elektronendichte bis ca. 5,5 µs ansteigt und dann bis etwa 11 µs ziemlich konstant bleibt, bis die Plasmasäule bedingt durch eine m = 2 Rotationsinstabilität zerfällt.

Die Form des dargestellten Kontinuumssignals war typisch für die Entladung und veränderte sich nicht wenn gasförmige Verunreinigungen bis zu 1 % oder ablatierte Verunreinigungen in geringen Mengen zugemischt wurden. Daher konnte die Kontinuumsintensität neben der C V Linie bei 2271 Å als Monitor für die Reproduzierbarkeit der Entladung benutzt werden.

Eindeutig lassen sich die Oszillationen auf dem Kontinuumssignal für Zeiten größer 11 µs durch die Rotation der zu diesem Zeitpunkt schon sehr deformierten Plasmasäule erklären. Aus den Bildern 8 - 18 ergeben sich verschiedene Winkelgeschwindigkeiten, die in Tabelle 4 als Funktion der Zeit wiedergegeben sind. Für den Zeitraum von 12 bis 16,1 µs beträgt die Winkelgeschwindigkeit im statistischen Mittel $(1{,}43 \pm 0{,}35) \cdot 10^6\ s^{-1}$.




Kontinuumsintensität bei λ=5230Å side-on in Spulenmitte

Abb. 15 a:

Streakaufnahme side-on in Spulenmitte (z=0cm, θ=0°)

Abb. 15 b:

Framingaufnahmen end-on

Abb. 15 c:

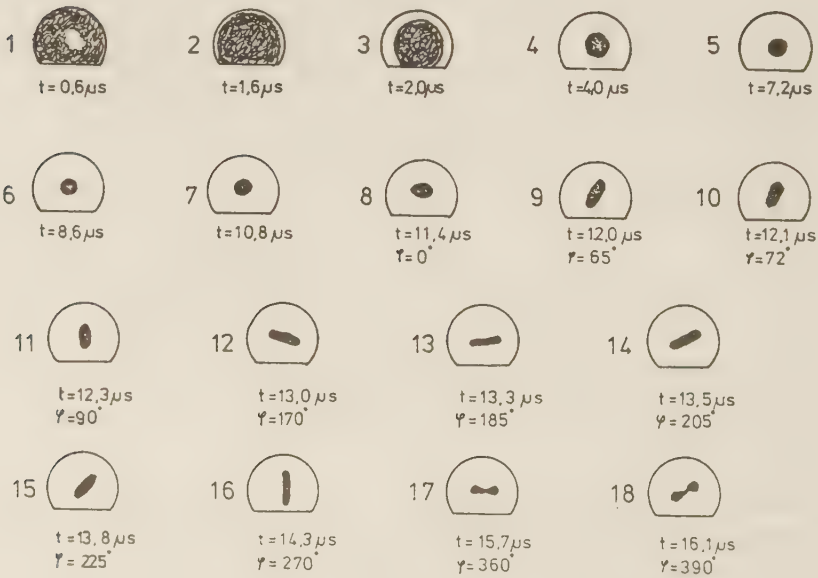



Abb. 15

| t / µs | ° / µs | $\omega$ / $10^6$ $s^{-1}$ |
|---|---|---|
| 12,0 | 108 | 1,88 |
| 12,1 | 70 | 1,22 |
| 12,3 | 90 | 1,57 |
| 13,0 | 114 | 1,99 |
| 13,3 | 50 | 0,87 |
| 13,5 | 100 | 1,74 |
| 13,8 | 67 | 1,17 |
| 14,3 | 90 | 1,57 |
| 15,7 | 60 | 1,05 |
| 16,1 | 75 | 1,31 |

Tab. 4

Versucht man trotz der relativ großen Schwankungen eine Regressionsgerade durch die Wertepaare zu legen, so nehmen die gemittelten Werte von 1,6 $10^6$ $s^{-1}$ bei 12 µs auf 1,2·$10^6$ $s^{-1}$ bei 16 µs ab. Die statistische Relevanz der Regressionsgeraden liegt jedoch nur bei 40 %.

Die Abnahme der Winkelgeschwindigkeit kann durch deformationsbedingte Zunahme des Drehmoments bei gleichbleibendem Drehimpuls erklärt werden. Schließlich schnürt sich das Plasma in der Mitte ein und bricht infolge der hohen Zentrifugalbeschleunigung auseinander.

Obwohl die Rotation von Theta-Pinch Plasmen schon früh beobachtet wurde /43/ konnten verschiedene theoretische Ansätze /44,45/ nicht zu einer eindeutigen Klärung der Ursachen beitragen. Neuere Messungen von Witulski /46/ favorisieren das Modell von Haines /47/. Es besagt im wesentlichen, daß die Rotation durch gyrierende Ionen verursacht wird, welche zu Beginn der Entladung an die Wand stoßen, und daher das Plasma mit einem entsprechenden Drehimpuls behaftet implodiert.

Haines selbst führte nur Rechnungen für ein homogenes, unendlich ausgedehntes Plasma durch. Sie liefern, verglichen mit den experimentellen Ergebnissen bei unserer Entladung, einen zu niedrigen Wert von $0{,}67 \cdot 10^6\ s^{-1}$ für $kT_i$ = 600 eV, B = 31.000 G und den Plasmaradius R = 2 cm. Witulski /46/ verfeinerte das Modell von Haines durch die Einbeziehung eines radialen Dichteprofils. Dadurch ergeben sich auch für unseren Fall theoretische Werte, die besser mit den experimentellen übereinstimmen, nämlich $1{,}3 \cdot 10^6\ s^{-1}$ bzw. $2{,}0 \cdot 10^6\ s^{-1}$ für ein kastenförmiges bzw. parabelförmiges Dichteprofil.

Andere Untersuchungen /48/, speziell an "reversed field" Theta-Pinchen, erhärten jedoch die Vermutung, daß bei dieser Konfiguration die Rotation durch die **Feld**verkürzung am Ende der Plasmasäule entsteht und vermittels Torsions-Alfvèn-Wellen auf die gesamte Plasmasäule übergreift.

Die theoretischen Ansätze von Freidberg und Pearlstein /49/ wurden von Steinhauer für "reversed field" Pinche weitergeführt /50/ und hatten als wesentliches Ergebnis, daß die Stabilität einer solchen Entladung empfindlich vom Aspektverhältnis R/a abhängt. R ist der große Radius, d.h. der Abstand der magnetischen Achse des Toroids zur Entladungsachse (vgl. Abb. 2). Der kleine Radius a ist bei Steinhauer wie folgt definiert:

$$a = (2 \cdot N_{e,m} \cdot R)^{-1} \cdot \int_0^\infty N_e(r) \cdot r\, dr \qquad (29)$$

$N_{e,m}$ ist hierbei die maximale Elektronendichte.

Setzen wir für unser Plasma ein trapezförmiges Elektronendichteprofil an, mit $N_e$ = const. für r = 0 cm bis r = 2 cm und einem linearen Abfall von r = 2 cm bis r = 3 cm (dies entspricht ganz gut den experimentellen Ergebnissen von Abschn. 3.3), so ergibt das Produkt R·a unabhängig von der

maximalen Elektronendichte den Wert 19/12 . R entspricht bei "reversed field" Pinchen dem Radius, an dem das eingefangene Magnetfeld auf Null abgeklungen ist. Aus Gleichgewichtsgründen ist dies der Radius, für den die maximale radiale Elektronendichte vorliegt (vgl. Abschn. 3.3).

Setzen wir wie oben R = 2 cm, so erhalten wir das Aspektverhältnis R/a = 2,53. Dieser Wert besagt, daß das Plasma sich im sogenannten "stark-viskosen" Bereich befindet, in dem die Rotation in der Mitte der Plasmasäule fast gleichzeitig mit der Rotation an den Enden startet und das Plasma quasi als starrer Körper rotiert. Da die Torsionswelle sich von den Enden her mit Alfvèn-Geschwindigkeit ausbreitet, liegt die Zeitverzögerung im Bereich

$$t_v = L/(2 \cdot v_A)$$

mit $v_A = 2{,}18 \cdot 10^{11} \cdot B / (A_r \cdot N_i)^{1/2}$ cm $s^{-1}$. ( 30 )

B in Gauss und $N_i$ in $cm^{-3}$.

Für die typischen Parameter unserer Entladung, B = 31.000 G $N_i = 3 \cdot 10^{16}$ $cm^{-3}$ und der Plasmalänge L = 30 cm erhält man: $v_A = 3{,}9 \cdot 10^7$ cm $s^{-1}$ und somit $t_v = 0{,}38$ µs.

Die Stabilitätszeit eines stark-viskosen "reversed field" Plasmas errechnet Steinhauer zu:

$$t_{st,sv} = \frac{L}{2 \cdot \sqrt{2 v_k}} \left( \operatorname{csch}^2 K + \frac{a \cdot 2 \cdot \sqrt{2}}{r_{io} \cdot \tanh K} \right)^{1/2} \qquad ( 31 )$$

mit der kinetischen Geschwindigkeit $v_k = (2 \cdot kT/m_i)^{1/2}$ und dem Ionenlamorradius $r_{io}$ für das Vakuummagnetfeld.

$$r_{io} = 102 \cdot (A_r \cdot kT_i)^{1/2} / (Z \cdot B) \text{ cm} \qquad ( 32 )$$

B in Gauss und $kT_i$ in eV.
Die Größe K ist als Funktion des Aspektverhältnis bei Steinhauer /50/ tabelliert.

Die Stabilitätszeit in der stark-viskosen Näherung liegt für unser Plasma mit 2 $\mu$s deutlich niedriger als die beobachtete.

Andererseits führt die erwähnte starke Abhängigkeit vom Aspektverhältnis dazu, daß eine Änderung des angenommenen Radius um 5 % auf R = 2,1 cm die stark-viskose Näherung zusammenbrechen läßt. Bei einem Aspektverhältnis von dann 2,8 gilt in der schwach-viskosen Näherung:

$$t_{st,wv} = \sqrt{2}\ (a \cdot r_{io} / \nu_1)\ f(R/a)\ (1 + \tanh K) \qquad (33)$$

Die Funktion f(R/a) ist wie K in Ref. 50 tabelliert.

Mit

$$\nu_1 = 3{,}7 \cdot 10^6 \sqrt{A_r}\ Z^2 \ln\Lambda \cdot kT_i^{-1} (Z\, kT_e + kT_i)^{-1}\ cm^2 s^{-1} \qquad (34)$$

ergibt sich in der schwach-viskosen Näherung eine Stabilitätszeit $t_{st,wv}$ von 22 $\mu$s.

Die experimentelle Stabilitätszeit von ca. 11 $\mu$s liegt genau zwischen beiden Werten. Es ist augenscheinlich, daß ein weitergehender Vergleich bei den gegebenen experimentellen Unsicherheiten bzgl. R und der starken R - Abhängigkeit der Theorie nicht sinnvoll ist.

## 3.2 Bestimmung der Plasmalänge

Wie aus Gl. 21 ersichtlich, ist die Intensität optisch dünner Spektrallinien proportional zur Länge des Beobachtungsvolumens. Bei der Bestimmung des zeitlichen Intensitätsverlaufs von Spektrallinien wurde in bisherigen Arbeiten die Beobachtungslänge als konstant vorausgesetzt. Es erschien uns jedoch sinnvoll die Länge der Plasmasäule zu verschiedenen Zeitpunkten der Entladung zu messen, um für end-on beobachtete Spektrallinien mögliche systematische Fehler auszuschließen.

Hierzu benutzten wir den side-on Monochromator mit dem Quarzglasquerschnittswandler, dessen rundes Ende in die Löcher entlang der z - Achse der Entladungsspule gesteckt wurde. Aus dem zeitlichen Verlauf der Kontinuumsintensität für verschiedene axiale Positionen z ließ sich die Länge der Plasmasäule als Funktion der Zeit bestimmen.

Sorgfalt wurde darauf verwandt sicherzustellen, daß der beobachtete Spektralbereich von ca. 50 Å um $\lambda$ = 5230 Å herum frei war von störenden Spektrallinien. Abb. 16 zeigt einen typischen Verlauf der Kontinuumsintensität entlang der z - Achse. Läßt man die kalten äußeren Bereiche außer Betracht, so kann man als Maß für die Plasmalänge in etwa die Distanz zwischen den beiden Punkten nehmen, an denen die Kontinuumsintensität auf die Hälfte des Maximalwertes abgesunken ist. Tabelle 5 führt die so ermittelten Plasmalängen als Funktion der Zeit nach Beginn der Hauptentladung für die beiden Bedingungen I und II auf. Man sieht, daß die Länge während des Zeitraums von 2 bis 10 µs praktisch konstant bleibt.

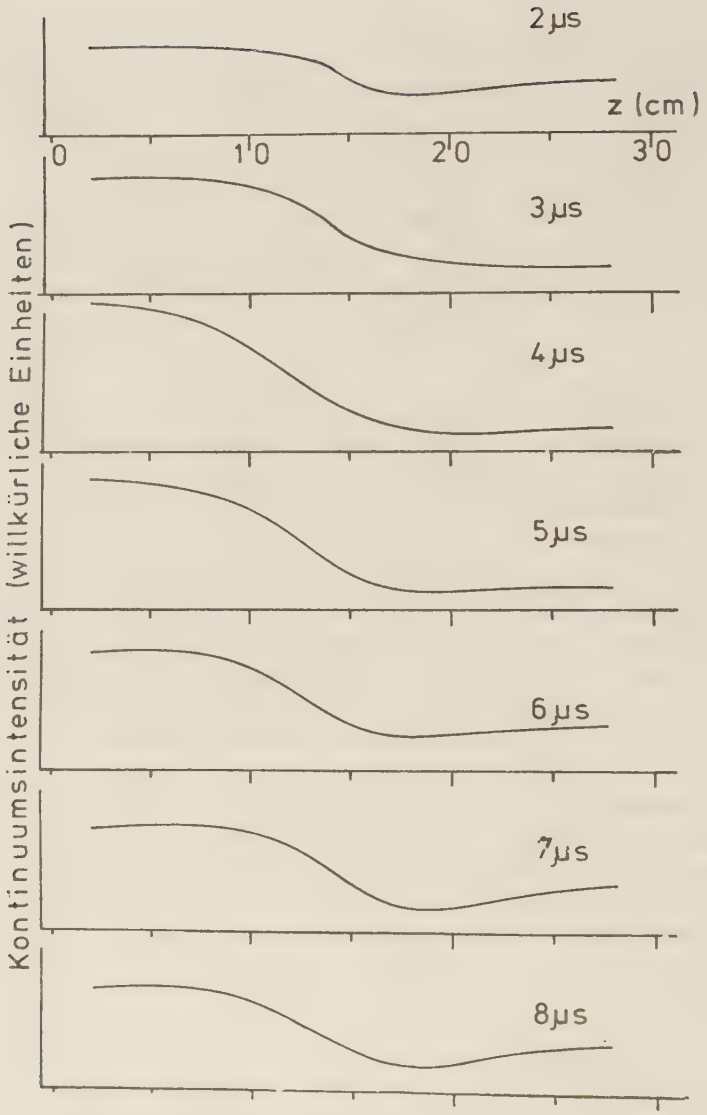

2µs
z (cm)
0
1'0
2'0
3'0
3µs
4µs
5µs
6µs
7µs
8µs
Kontinuumsintensität (willkürliche Einheiten)

Abb. 16

| t (µs) | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Bed. I<br>' (cm)<br>Bed. II | [illegible]<br>28±2 | [illegible] | [illegible]<br>27±2 | [illegible] | [illegible]<br>26±2 | 28±2 | 27±<br>26± | 28±2<br>26±2 | [illegible]<br>[illegible] |

Tab. 5

Geringfügige Beimengungen gasförmiger Verunreinigungen (1 % Sauerstoff oder Neon, 0,5 % Argon oder 0,25 % Krypton) bewirkten keine Änderung bezüglich der Längenkonstanz, wenn auch die absolute Plasmalänge für die Verunreinigungen mit höherem Z etwas kleiner wurde.

Bei einer deutlichen Erhöhung der Konzentrationen über das angegebene Maß hinaus beginnt das Plasma sich zu verändern. Bis etwa 5 % Neon, 2 % Argon oder 1 % Krypton bleibt die Lebensdauer des Plasmas noch in etwa erhalten, jedoch verschwinden die für die Rotation typischen Oszillationen auf dem Kontinuumssignal, die Kontinuumsintensität steigt insbesondere für späte Zeiten stark an und die Plasmalänge ist nicht mehr zeitunabhängig, sondern schrumpft im Verlauf der Entladung.

Bei einer weiteren Erhöhung des Fremdgaspartialdruckes verkürzt sich auch die Lebensdauer des Plasmas, die Kontinuumsintensität nimmt um Größenordnungen zu und die Länge schrumpft auf ein Minimum.

Schon Hintz und Kolb /51/ beobachteten eine starke Beeinflußung der Plasmastabilität durch Verunreinigungen. Konzentrationen in der Größenordnung von 1 % Kohlenstoff oder Sauerstoff führten in ihrer Entladung dazu, daß das Plasma förmlich "explodierte" und kein Einschluß mehr möglich war.

Theoretische Rechnungen /52/ und Beobachtungen an anderen Experimenten /53,54/ erhärteten die Erkenntnis, daß die Verunreinigungen die Strahlungsverluste der Plasmen drastisch erhöhen. Den Hauptanteil hat hierbei nach neueren Rechnungen für Eisen /55/ die Linienstrahlung, zumindest solange bis die Verunreinigungsionen fast ganz durchionisiert sind. Als Folge der Strahlungsverluste ging zum Beispiel an anderen Experimenten /53/ bei 5 % Kohlenstoffbeimengung die Elektronentemperatur von 400 eV auf rund 150 eV zurück.

Neuere Messungen an "schnelleren" Entladungen /56/ zeigten jedoch, daß die Strahlungsverluste kleiner bleiben als die Verluste durch Wärmeleitung zu den Enden hin, wenn die Verunreinigungskonzentrationen 0,5 % nicht überschreiten. Sogar 5 % Beimengung von Sauerstoff setzte die Elektronentemperatur im Endeffekt nicht herab.

Wesentlich für die schnellen Entladungen ist dabei, daß die Heizrate zu jedem Zeitpunkt die End- und Strahlungsverluste übersteigt.

Auf Grund dieser Überlegungen beschränkten wir uns bei unseren Messungen bewußt auf die anfangs genannten Konzentrationen, durch die das Plasma nicht gestört wird.

Als wichtig erwies sich die Bestimmung der Plasmalänge bei ablatierten Verunreinigungen. Wie schon in der Arbeit von Haumann /41/ gezeigt, führt die einseitige Ablation von festen Verunreinigungen mittels $CO_2$ - Laserstrahlung dazu, daß das Plasma als ganzes entlang der z - Achse vom Target wegdriftet. Abb. 17 zeigt ein Beispiel für eine solche Messung. Aufgetragen ist die Kontinuumsintensität entlang der z - Achse für verschiedene Zeiten nach Beginn der Hauptentladung. Der Darstellung kann man nicht nur die Schwerpunktsgeschwindigkeit des driftenden Plasmas entnehmen, man erhält auch eine Information über Änderungen der Plasmalänge mit der Zeit.

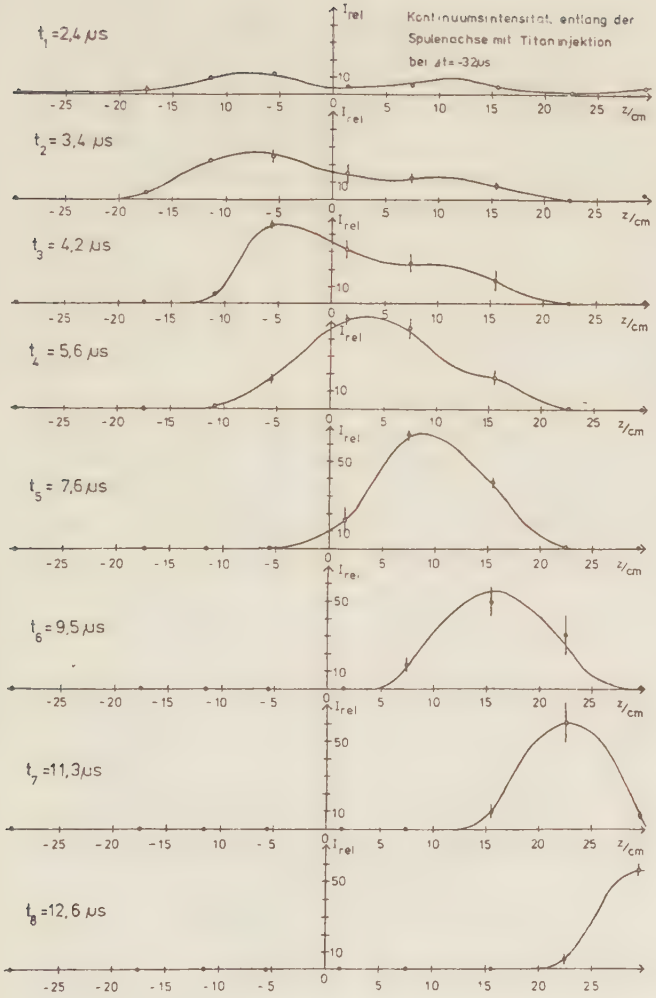

Kontinuumsintensität entlang der Spulenachse mit Titaninjektion bei Δt=-32μs
t1 =2,4 μs
t2 = 3,4 μs
t3 = 4,2 μs
t4 = 5,6 μs
t5 = 7,6 μs
t6 = 9,5 μs
t7 =11,3μs
t8 =12,6 μs
I rel
z/cm

Abb. 17

Die Höhe der Driftgeschwindigkeit war abhängig von der Konzentration der Verunreinigungsatome und Ionen in der Hauptentladung. Als Maß hierfür eignet sich die Intensität einer geeigneten Spektrallinie. Trägt man z.B. für den Fall ablatierten Titans die Driftgeschwindigkeit gegen die Intensität der Titan X Linie bei 289,6 Å auf, so erhält man den in Abb. 18 gezeigten Zusammenhang.

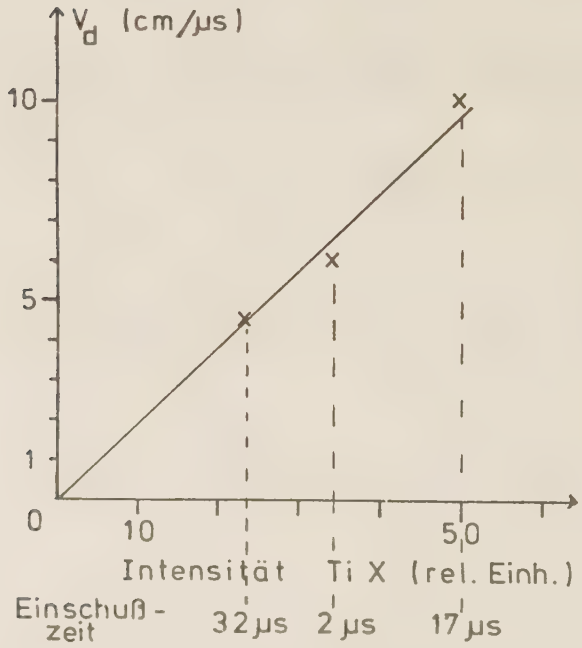



Abb. 18

Da andererseits die Driftgeschwindigkeit für die Lebensdauer des Plasmas im Entladungsbereich maßgebend ist, erhält man den im Abschnitt 2.5 schon erwähnten Zusammenhang zwischen der Lebensdauer des Plasmas und der Intensität der Spektrallinien ablatierter Ionen.

Bei allen Messungen mit ablatierten Ionen galt es also, bei noch ausreichender Intensität der zu beobachtenden Linien, die Konzentration der ablatierten Verunreinigungen möglichst homogen und möglichst niedrig zu halten, um die Beeinflußung des Plasmas zu minimieren und die Lebensdauer zu maximieren, damit möglichst hohe Ionisationsstufen erreicht wurden.

Die Änderung der Plasmalänge wurde aus den Messungen bestimmt und ist in Tab. 6 zusammengefaßt. Man sieht, daß nur für späte Zeiten eine Verkürzung stattfindet, wenn das Plasma den Entladungsbereich verläßt. Hier ergeben sich leichte Korrekturen für die Zeitverläufe end-on aufgenommener Spektrallinien hochionisierter Atome. Diese sind in Abschnitt 3.6 beschrieben. Die dafür notwendigen Korrekturfaktoren finden sich in Tab. 6 a .

| t (µs) | 2,0 | 4,0 | 6,0 | 7,5 | 8,0 | 9,5 | 10,0 | Verunreinigung |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| L (cm) | 25±2 | 24±2 | 26±3 | 25±2 | 22±2 | 17± | 14±2 | Aluminium |
| | 24±2 | 24±2 | 25±2 | 26±2 | 21±2 | 18±2 | 15±2 | Silizium |
| | 24±3 | 20±2 | 23±3 | 24±2 | 20±2 | 18±2 | 14±2 | Titan |

Tab. 6

| t (µs) | 1,0 | 7,5 | 8,0 | 8,5 | 9,0 | 9,5 | 10, | Verunreinigung |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Faktor | 1,00 | 1,08 | 1,17 | 1,28 | 1,42 | 1,53 | 1,71 | Aluminium |
| | 1,00 | 1,07 | 1,15 | 1,24 | 1,36 | 1,44 | 1,64 | Silizium |
| | 1,00 | 1,07 | 1,1 | 1,24 | 1,35 | 1,46 | 1,64 | Titan |

Tab. 6 a

## 3.3 Elektronendichte und Temperatur

Den zeitlichen Verlauf der Elektronendichte und Temperatur, wie er mit Hilfe der Lichtstreuung für die beiden Bedingungen 20 mTorr Wasserstoff Fülldruck ( Bed. I ) und 12 mTorr Wasserstoff Fülldruck (Bed. II ) bestimmt wurde, zeigen die Abbildungen 19 und 20.

Die eingezeichneten Werte entsprechen den Meßwerten in der Mitte des Entladungsgefäßes ( r = 0 cm und z = 0 cm) . Die durchgezogene Linie entspricht der Mittelung über den Radius und gleichzeitig dem zeitlichen Verlauf, der als Vorgabe für das numerische Integrationsprogramm verwendet wurde.

Elektronendichte und Temperatur steigen anfänglich relativ schnell an, dabei eilt die Temperatur der Dichte typischerweise etwas voraus. Die Elektronentemperaturen erreichen ihren Maximalwert bei ca. 3 µs bzw. ca. 4 µs, bleiben dann relativ konstant und fallen nach Erreichen der maximalen Kompression ( bei 4,8 µs bzw. 5,75 µs für Bed. I bzw. II) langsam ab. Die Dichten erreichen ihre Maxima kurz vor der maximalen Kompression, bleiben kurze Zeit konstant, um dann auch langsam abzufallen.

Beide Entladungen sind schon zu einem recht frühen Zeitpunkt radial homogen, wie die Abbildungen 21 bis 24 zeigen. Elektronendichte und Temperatur sind hier als Funktion des Radius in der Mitte des Entladungsgefäßes für verschiedene Zeitpunkte nach Beginn der Hauptentladung dargestellt. Die für Theta-Pinch Entladungen mit antiparallel überlagerten Magnetfeld typische Absenkung der Dichte und Temperaturwerte für r = 0 cm ist nur schwach ausgeprägt, da das antiparallele Bias-Feld nur relativ schwach ist, verglichen mit dem Feld der Hauptentladung.

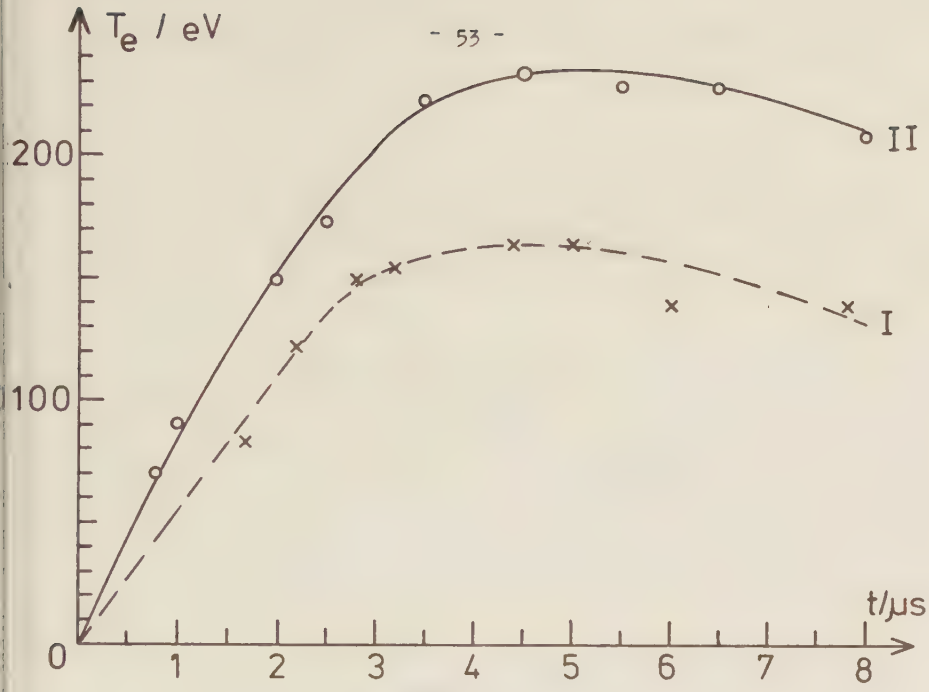

$T_e$ / eV
200
100
0
1
2
3
4
5
6
7
8
t/µs
II
I

Abb. 19

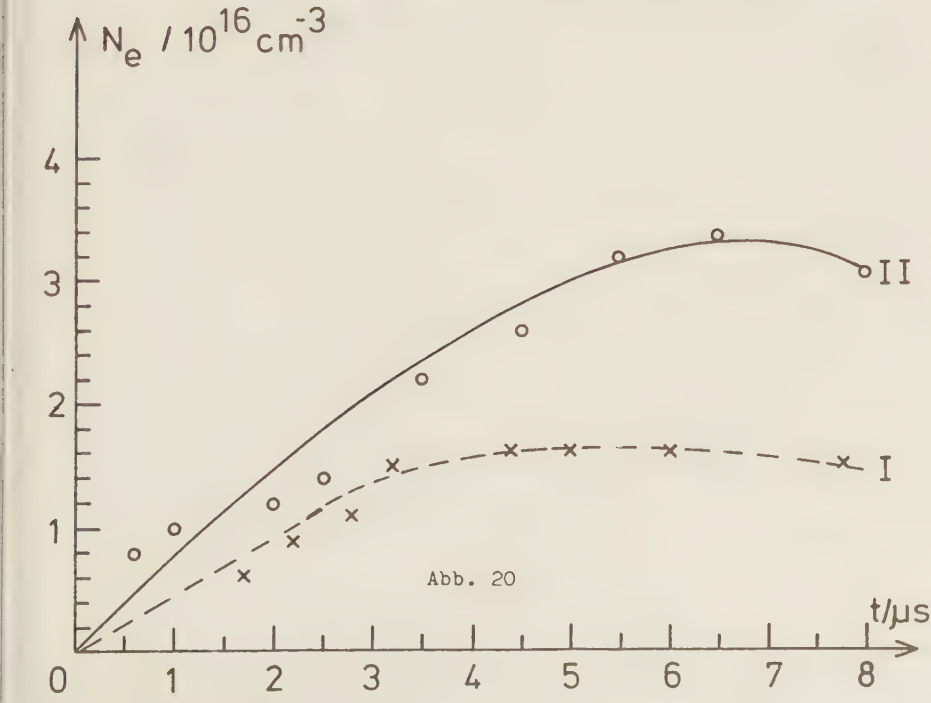

$N_e$ / $10^{16}$ $cm^{-3}$
4
3
2
1
0
1
2
3
4
5
6
7
8
t/µs
II
I

Abb. 20

I

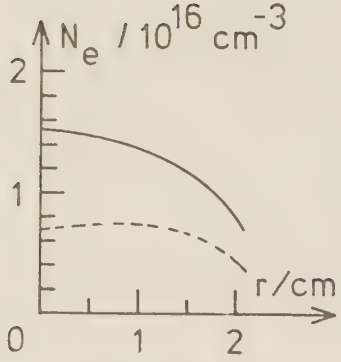



Abb. 21

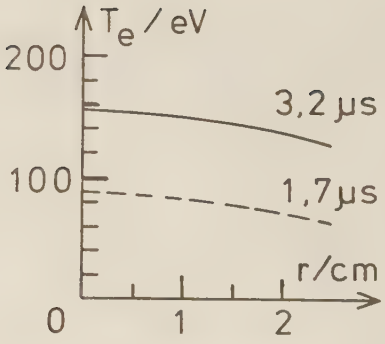



Abb. 22

II

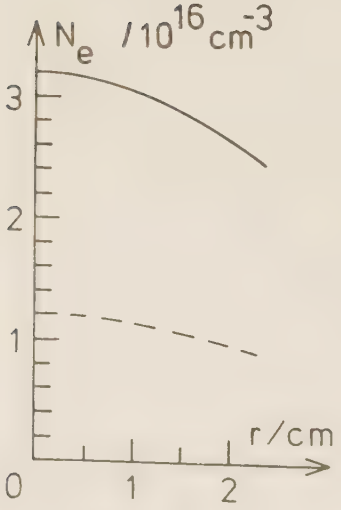



Abb. 23

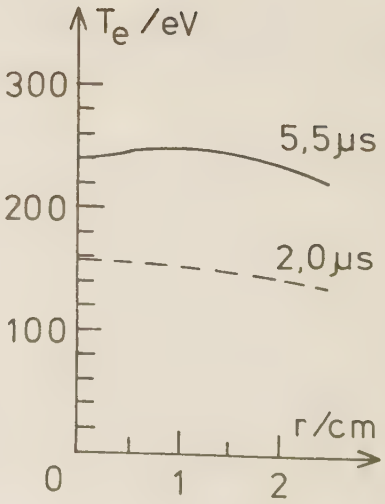



Abb. 24

Kontrollmessungen ergaben, daß Elektronendichte und Temperaturwerte sich im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht änderten, wenn gasförmige Verunreinigungen in den Konzentrationen beigemischt wurden, die im vorigen Abschnitt diskutiert worden sind.

Für die Messungen mit ablatierten Ionen verhinderte das Wegdriften des Plasmas Lichtstreumessungen in Plasmamitte, da nur in der Mitte des Entladungsgefäßes ein genügend großer Spalt zur Verfügung stand. Aus anderen Messungen läßt sich jedoch schließen, daß Elektronendichte und Temperatur des herausdriftenden Plasmas sich gegenüber dem "stationären" Fall nicht verändern. Unter Vorgriff auf später beschriebene Ergebnisse sind die wesentlichen Punkte im folgenden zusammengestellt.

a. Die Ionentemperatur bleibt für beide Fälle im Rahmen der Meßgenauigkeit gleich. (vgl. Abschn. 3.4)

b. Für gasförmig eingebrachte und für ablatierte Siliziumionen ergeben sich die gleichen spektralen Zeitverläufe. ( vgl. Abschn. 3.5 )

c. Der Zeitverlauf einiger ausgewählter Spektrallinien hochionisierter Atome wie C V, C VI und O VII bleibt unverändert. Diese Linienverläufe reagieren wegen der hohen Anregungsenergie der zugehörigen oberen Energieniveaus besonders empfindlich auf Änderungen im Elektronendichte und Temperaturverlauf. Numerische Simulationsrechnungen mit ansonsten unveränderten Parametern zeigen dies deutlich. Um 10 % erniedrigte Dichtewerte sowohl als auch um 10 % erniedrigte Temperaturwerte resultieren deutlich in unterschiedlichen Linienverläufen ( Abb. 25 a - d ). Auch Kombinationen aus erhöhten Dichtewerten und erniedrigten Temperaturwerten oder umgekehrt konnten die Linienverläufe des "Normalfalles" nicht reproduzieren.

d. Die mit Hilfe dieser Annahme abgeleiteten Ionisationsraten ergaben da, wo sie vergleichbar waren mit anderen Ergebnissen der gleichen isoelektronischen Sequenz zum Beispiel, konsistente Ergebnisse. ( vgl. Abschn. 5.3 )

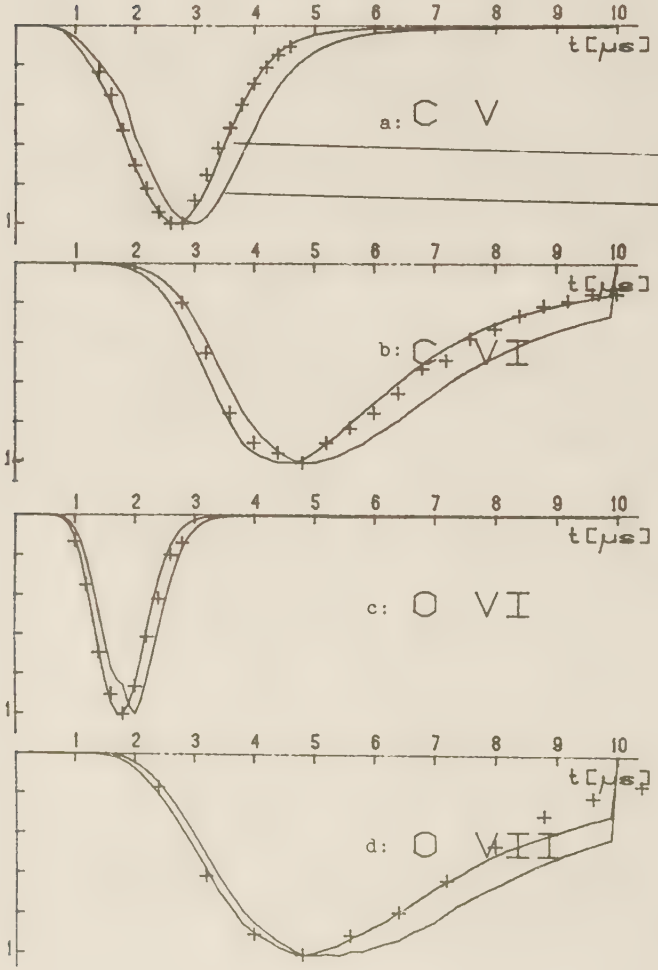



Abb. 25
numerische Linienverläufe

## 3.4 Ionentemperatur

Wie in Abschnitt 2.4.2 beschrieben bestimmten wir die Ionentemperatur aus der Dopplerverbreiterung der C V Linie bei 2271 Å und der C VI Linie bei 3434 Å.

Ca. 4 µs nach Beginn der Hauptentladung ist die Ionisation der Kohlenstoffatome so weit fortgeschritten, daß die Intensität der C V Linie für eine Messung nicht mehr ausreicht. Die C VI Linie andererseits konnte nur für Bed. II beobachtet werden. Es ist wahrscheinlich, daß bei Bed. I die Elektronendichten und Temperaturen nicht ausreichend sind für eine genügend große Anregung.

Abb. 26 zeigt die Ergebnisse für Bed. I, Bed. II und Bed. II mit ablatierten Ionen. Wie schon im vorigen Abschnitt erwähnt, sind für Bed. II die Ionentemperaturen mit ablatierten Ionen im Rahmen der Meßgenauigkeit gleich denen mit gasförmig eingebrachten Verunreinigungen und liegen bei maximal 700 eV. Sie sind damit in etwa dreimal so hoch wie die maximale Elektronentemperatur von 230 eV. Dies ist für Theta-Pinch Entladungen typisch /58,59/, da während der schnellen Kompression vornehmlich die Ionen kinetische Energie erhalten. Diese thermalisieren dann durch Stöße und turbulente Effekte /60/.

Bezüglich der Energiebilanz der Elektronen stellt sich ein Gleichgewicht ein zwischen der Aufheizung durch die Ionen und Endverlusten durch Wärmeleitung und Teilchenströme. Diese Gleichgewichtsbetrachtung führt zu folgendem Zusammenhang /61/

$$T_e = \left[0{,}86\ 10^{-29}\ N_e^2\ L\ l\ T_i\ (\ln\Lambda)^2 / A_i\right]^{1/5} \qquad (34)$$

L : halbe Spulenlänge ; l : Abstand der Plasmasäule zur Wand

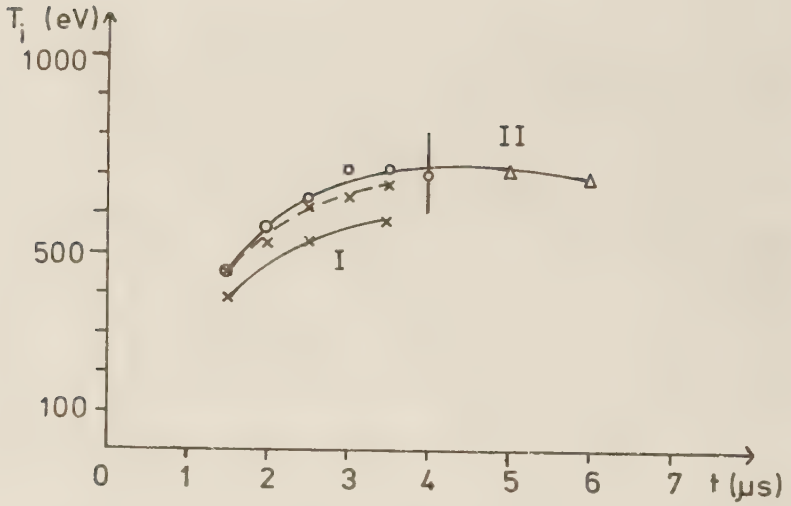



Abb. 26 ; I : Bed. I , x : mit C V Linie gemessen
II : Bed. II, x : mit ablatierten Ionen, mit C V Linie gemessen; o : mit gasförmig eingebrachten Ionen und CV Linie; Δ : wie zuvor mit C VI Linie.

Bei einem Wasserstoffplasma mit Dichten von $3 \cdot 10^{16}$ $cm^{-3}$ ergeben sich für Ionentemperaturen von 700 eV Elektronentemperaturen von ca. 200 eV ( L = 30 cm, l = 10 cm, $\ln \Lambda = 14$, $A_i = 1$).

Eine weitere Abschätzung kann man aus dem Kompressionsgleichgewicht erhalten.

$$B^2 / 2\mu_o = N_e kT_e + N_i kT_i \qquad (35)$$

Setzt man B = 31.000 G, $N_e = N_i = 3\ 10^{16}$ $cm^{-3}$ und $kT_e$ = 200 eV so erhält man für die Wasserstoffionen $kT_i$ = 600 eV.

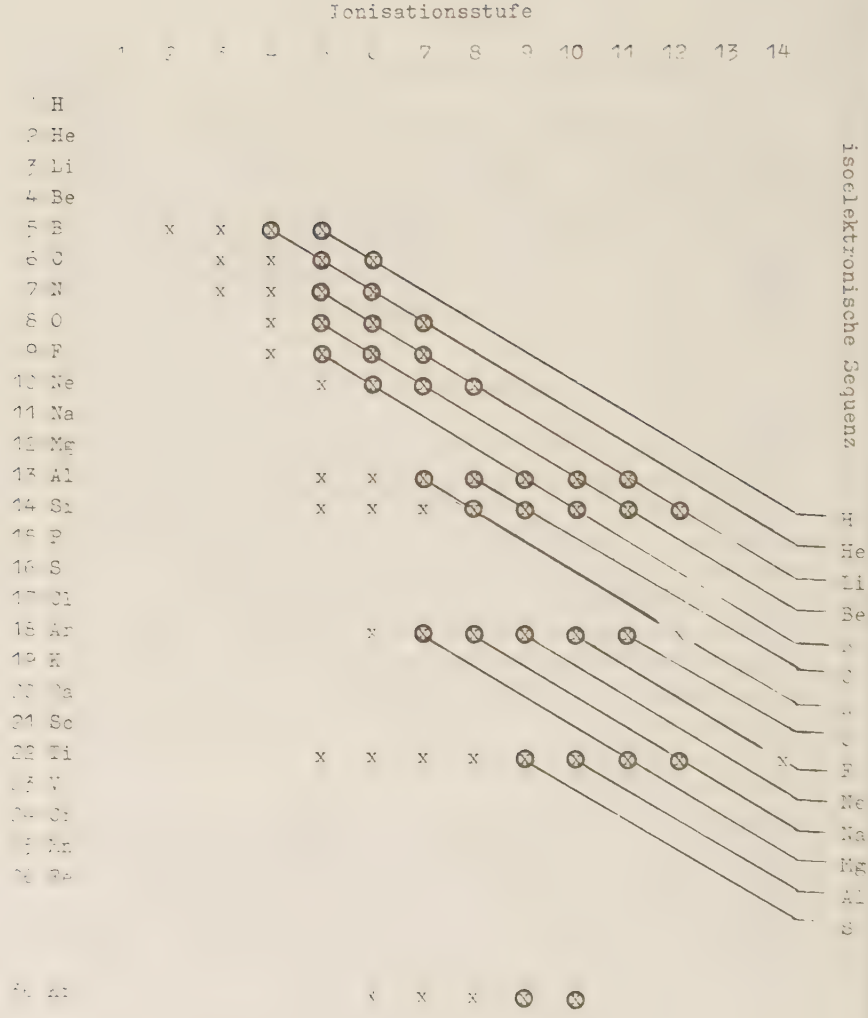
Die Meßergebnisse bewegen sich also in vernünftigem Rahmen.

## 3.5 Spektroskopische Messungen

Spektrallinien der verschiedensten Atome und Ionisationsstufen wurden zeitaufgelöst sowohl end-on als auch side-on in Emission gemessen. Tabelle 7 gibt hierüber einen Überblick. Kreuze deuten auf spektroskopische Messungen hin, Kreise zeigen an, für welche Ionisationsstufen Ratenkoeffizienten abgeleitet werden konnten. Eine Zusammenstellung der beobachteten und ausgewerteten Spektrallinien im einzelnen befindet sich im Anhang.

Bei möglichst vielen Ionisationsstufen versuchten wir geeignete Spektrallinien sowohl side-on als auch end-on zu messen und deren Zeitverlauf zu vergleichen. Auf diese Art und Weise kann man Aufschluss über wesentlichen Eigenschaften des Plasmas gewinnen, wie Homogenität, optische Dicke und eventuelle Änderungen in der Länge des Beobachtungsvolumens durch axiale oder radiale Kompressionen. Durch eine Übereinstimmung der side-on und end-on gemessenen Linienverläufe lassen sich deshalb eine Reihe systematischer Fehlermöglichkeiten ausschalten. Für die im Rahmen dieser Arbeit benutzten Plasmabedingungen waren in allen beobachteten Fällen die Zeitverläufe von Spektrallinien einer Ionisationsstufe side-on sowie end-on im Rahmen der Meßgenauigkeit von ca. 10 % identisch.

Eine solche Übereinstimmung ist keineswegs selbstverständlich. Dies zeigt Abb. 27, der eine andere Plasmabedingung zugrunde liegt. Der Verlauf der Kontinuumsstrahlung (b), sowie ausgewählter Spektrallinien (c - e) sieht vernünftig aus. Macht man jedoch einen side-on end-on Vergleich, z.B. bei C V (h - i), so erkennt man deutliche Unterschiede sowohl für den Zeitpunkt des Intensitätsmaximums als auch für das zeitliche Profil der Linie. Diese sowie mehrere andere untersuchte Plasmabedingungen war deshalb nicht geeignet für eine eindeutige Bestimmung von Ionisationsratenkoeffizienten.


Ionisationsstufe
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14
isoelektronische Sequenz
H
He
Li
Be
B
C
N
O
F
Ne
Na
Mg
Al
Si
P
S
Cl
Ar
K
Ca
Sc
Ti
V
Cr
Mn
Fe
Ni

Tab. 7

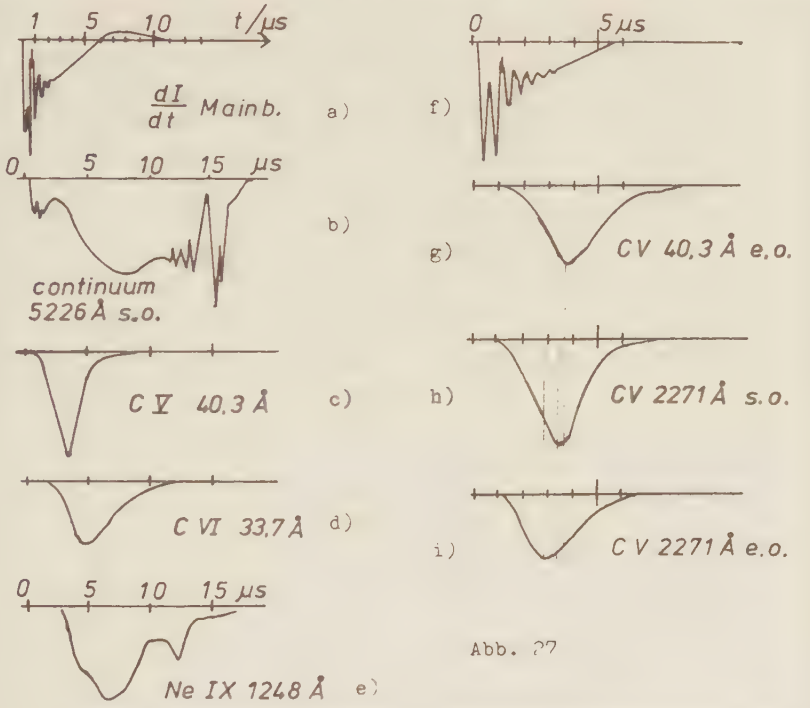



Abb. 27

Obwohl zumindestens Kohlenstoff und Sauerstoff als natürliche Verunreinigungen im Plasma enthalten sind, fügten wir für alle Messungen die benötigten Elemente in wohldosierten Mengen zu. Dieses Vorgehen sicherte eine ausreichende Reproduzierbarkeit der Spektralintensitäten.

Die Elemente von Bor bis Neon bzw. Silizium, Argon und Krypton wurden dem Füllgas Wasserstoff in Form reiner Gase bzw. gasförmiger Verbindungen zugemischt. Einzelheiten sind Tab. 8 zu entnehmen. Durch die angegebenen Verunreinigungskonzentrationen fand eine Beeinflußung des Plasmas nicht statt. Dies ergab sich aus der Beobachtung geeigneter Monitorlinien (vgl. Abschn. 3.3 ) sowie punktuell durchgeführter Lichtstreumessungen.

| Verunreinigung | Verbindung | | Partialdruck (mTorr) | Atome/H-Atome ( % ) |
|---|---|---|---|---|
| Bor | Diboran | $B_2H_6$ | 0,1 | 1 |
| Kohlenstoff | Methan | $CH_4$ | 0,2 | 1 |
| Stickstoff | rein | $N_2$ | 0,1 | 1 |
| Sauerstoff | rein | $O_2$ | 0,1 | 1 |
| Fluor | Tetra-fluormethan | $CF_4$ | 0,05 | 1 |
| Neon | rein | Ne | 0,2 | 1 |
| Silizium | Mono-silan | $SiH_4$ | --- | ~ 0,5 * |
| Argon | rein | Ar | 0,1 | 0,5 |
| Krypton | rein | Kr | 0,05 | 0,25 |

Tab. 8

* geschätzt

Aluminium und Titan wurden, wie oben schon ausführlich beschrieben, mittels $CO_2$-Laser Ablation in die Entladung eingebracht. Eine Konzentrationsbestimmung für die so eingebrachten Atome war nicht möglich. Jedoch schwächten wir die Leistungsdichte des $CO_2$-Lasers für die Messungen jeweils soweit ab, daß auf Grund des Zeitverlaufes der C V, C VI und O VII Monitorlinien eine Beeinträchtigung der Plasmaparameter ausgeschlossen werden konnte. Eine leichte Erniedrigung der end-on Intensitäten dieser Linien für Zeiten größer 7 µs kann auf die Längenänderung des Plasmas zurückgeführt werden.

Um ganz sicherzustellen, daß das Ablationsverfahren den zeitlichen Verlauf der Spektrallinien nicht verändert, machten wir für Silizium eine Vergleichsmessung. Siliziumatome wurden einmal ablatiert, das andere Mal gasförmig der Entladung zugeführt. Für die Ablation benutzten wir als Target einen Stab aus Duranglas, der ebenso wie die Metalltargets um 45 ° zur Einfallsrichtung des $CO_2$-Lasers angeschrägt war. Durch zwei Polyäthylenfolien und eine leichte Defokussierung des Lasers auf dem Target erreichten wir, daß die relativen Intensitäten und Zeitverläufe der typischen Sauerstofflinien übereinstimmten mit denjenigen, die bei 1 % Sauerstoffzugabe zum Wasserstoffplasma gemessen worden waren.

Da der Duranstab hauptsächlich aus $SiO_2$ besteht, läßt sich für diese Bedingung die mittlere Konzentration des Siliziums zu 0,5 % angeben. Da über den Ablationsvorgang noch recht wenig bekannt ist, bleibt die Unsicherheit ob pro Entladung Silizium und Sauerstoff stets in gleichem Verhältnis freigesetzt werden. Deshalb kann diese Konzentrationsangabe nur als Anhaltspunkt dienen.

Für die gasförmige Beimengung benutzten wir Silangas ($SiH_4$). Auch hier war eine direkte Konzentrationsbestimmung nicht möglich, da das von uns benutzte Ionisationsvakuummeter eine Partialdruckbestimmung nicht zuließ. Zum einen waren die Umrechnungsfaktoren für die auf Stickstoff geeichten Meßröhren für Silan auch nach Rücksprache mit dem Hersteller nicht zu erfahren, zum anderen verursachte das Aufglühen der Ionisationsmeßröhre stets ein Zünden des leicht brennbaren Silangases innerhalb des Entladungsgefäßes. Wir dosierten daher die zugemischte Menge Silangas so, daß die Intensitäten der gemessenen Siliziumspektrallinien mit denen im ablatierten Fall vergleichbar waren.

Abb. 28 zeigt nun die Intensitätsverläufe von Siliziumspektrallinien für gasförmige und ablatierte Verunreinigungen. Abb. 29 zeigt die dazugehörigen Monitorlinien. Die zu beobachtende Übereinstimmung läßt den Schluß zu, daß die $CO_2$ - Ablation die Bestimmung der Ratenkoeffizienten nicht beeinflußt.

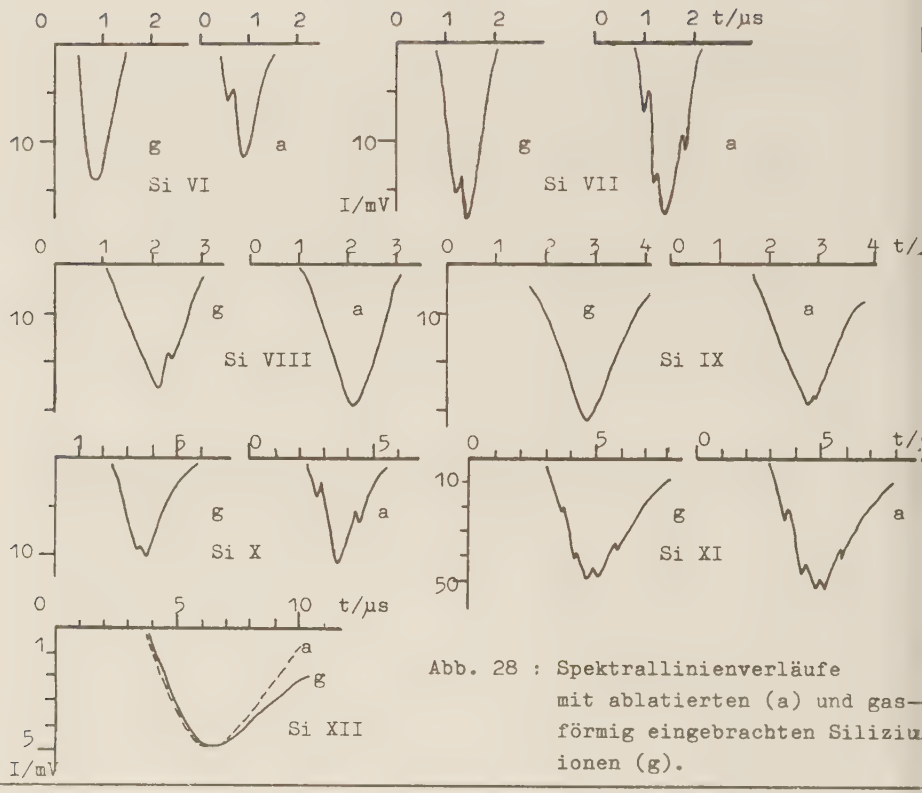



Abb. 28 : Spektrallinienverläufe mit ablatierten (a) und gasförmig eingebrachten Siliziu ionen (g).

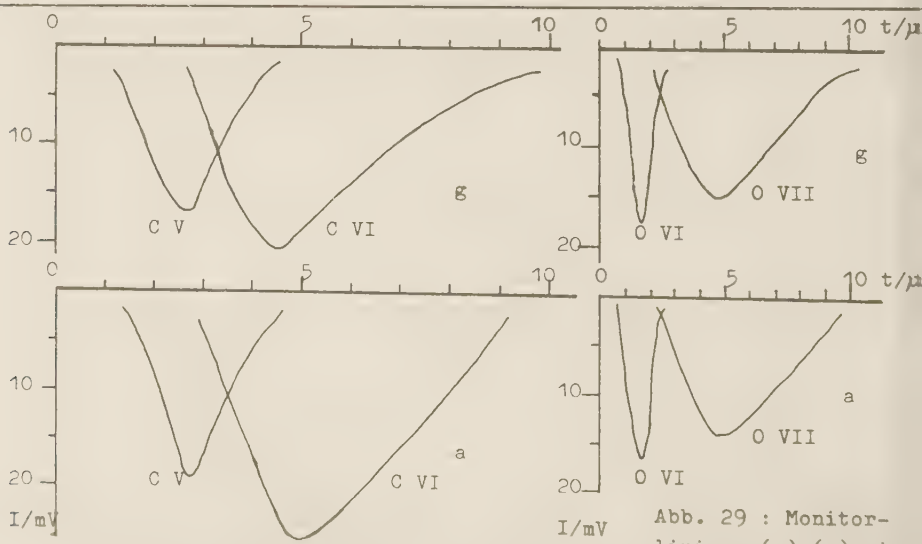



Abb. 29 : Monitorlinien; (a),(g) wie

## 3.6 Auswertung

Bei der Auswertung der spektralen Linienverläufe gab es mehrere Gesichtspunkte zu beachten, die wir nun diskutieren wollen.

Zuerst wurden die Intensitäten der Spektrallinien als Funktion der Zeit auf ihren Maximalwert normiert. Dies erleichterte den side-on end-on Vergleich und den Vergleich verschiedener Spektrallinien aus gleicher Ionisationsstufe. Ferner war es notwendig für die Anpassung durch das numerische Programm.

Sodann galt es für die Fälle der ablatierten Silizium-, Aluminium- und Titanatome die Längenänderung des Plasmas für Zeiten größer 7 µs zu berücksichtigen. Dies geschah unter Zugrundelegung der Tab. 6. Bei optisch dünnen, homogenen Plasmen sollte eine Längenänderung von z.B. 20% auch eine Änderung der end-on gemessenen Intensität um 20% bewirken. Aus Tab. 6 errechnen sich daher die in Tab. 6a angegebenen Korrekturfaktoren.
Aus den normierten Intensitätsverläufen gewannen wir dann pro Ionisationsstufe einen Satz von fünf bis zwanzig Wertepaaren $t_i$, $I(t_i)$ als Vorgabe für das numerische Anpassverfahren. Bei der Auswahl der Wertepaare achteten wir darauf, daß der Linienverlauf und insbesondere der jeweilige Maximalwertmöglichst genau wiedergegeben wurde.

Durch sukzessive Variation der Koeffizienten A(K) in der Ionisationsformel passten wir dann die numerisch berechneten Linienverläufe an die experimentelle Vorgabe an.

Der Zeitverlauf der Intensität einer Spektrallinie I(t) wird charakterisiert durch die zeitliche Ableitung von Gl.24:

$$\frac{1}{I}\frac{dI}{dt} = \frac{1}{X_j}\frac{dX_j}{dt} + \frac{1}{N_e}\frac{dN_e}{dt} + \frac{1}{N_j}\frac{dN_j}{dt} + \frac{1}{L}\frac{dL}{dt} \qquad (36)$$

Berücksichtigt man

$$X_j(kT_e) \sim \frac{1}{\Delta E \sqrt{kT_e}} \cdot \exp(-\Delta E/kT_e) \qquad (37)$$

und setzt $dN_j/dt$ aus Gl. 3 ein, so ergibt sich bei Vernachlässigung der Rekombination:

$$\frac{1}{I}\frac{dI}{dt} = \frac{2}{N_e}\frac{dN_e}{dt} + \left(\frac{\Delta E}{kT_e} - \frac{1}{2}\right)\frac{1}{kT_e}\frac{d(kT_e)}{dt} + \frac{1}{L}\frac{dL}{dt} + \frac{N_{j-1}}{N_j} S_{j-1} N_e - S_j N_e \qquad (38)$$

Hieraus ist ersichtlich, daß Dichtevariationen den Zeitverlauf stark beeinflußen, Änderungen in der Temperatur jedoch nicht so stark durchschlagen, solange die Anregungsenergie $\Delta E$ des betrachteten Übergangs etwa halb so groß ist wie die Elektronentemperatur.

Ferner kann man sehen, daß bei relativ konstantem Dichte- und Temperaturverlauf der ansteigende Flügel der Zeitverläufe der Spektrallinien durch das Wechselspiel der Größen $(N_{j-1}/N_j)\, S_{j-1}$ und $S_j$ bestimmt wird, wohingegen für den Abfall im wesentlichen $S_j$ allein maßgeblich ist, da dann meistens schon $N_{j-1}$ klein gegen $N_j$ geworden ist.

Deshalb gilt es bei der Anpassung, nicht nur den Scheitelwert richtig wiederzugeben, sondern auch den jeweiligen zeitlichen Anstieg und Abfall der Intensitäten.

Abb. 30 zeigt als Beispiel die Anpassung der Kohlenstofflinien für die Plasmabedingung II. Wesentlich für die Güte der Anpassung und damit für die Genauigkeit bei der Bestimmung der Ratenkoeffizienten ist die minimale Variation des Parameters A(K), die sich als deutliche Fehlanpassung des numerischen Verlaufs niederschlägt. Sie betrug in der Regel 20 % - 30 % des optimalen Wertes. Als Beispiel hierfür gibt Abb. 31 die gleiche Bedingung wie Abb. 30 wieder, jedoch wurde der Faktor A(C VI) um 20 % gegenüber der optimalen Anpassung erniedrigt. Die Fehlanpassung ist deutlich zu sehen.

Als Ergebnis erhält man also für jede Ionisationsstufe einen Satz von Koeffizienten A(K), welcher multipliziert mit den theoretischen Ionisationsratenkoeffizienten gemäß der benutzten Formel den effektiven experimentellen Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation des entsprechenden Ions liefert.

Nun ist das Plasma aber in der Anfangsphase der Entladung noch sehr dynamisch und inhomogen. Um dieser Situation Rechnung zu tragen interpretieren wir die Zahlenwerte für alle während dieser Phase auftretenden Ladungszustände nicht als experimentelle Ratenkoeffizienten, sondern als freie Parameter, die die Anfangsbedingungen der Entladung modellieren. Für das Beispiel Kohlenstoff bei 12 mTorr Fülldruck (Abb. 30) werden also durch die Anpassung der C III und C IV Linienintensitäten die Anfangsbedingungen für die Messung der Ratenkoeffizienten von C V und C VI modelliert. Dies beinhaltet auch, daß nur Ratenkoeffizienten von Ladungszuständen bestimmt werden, die während der homogenen Phase der Entladung durchionisiert werden. Da die Ungenauigkeiten bei der Bestimmung des Elektronendichte und Temperaturverlaufes gerade zu Beginn der Entladung am größten sind, hat dieses Vorgehen den weiteren Vorteil, geringfügige Fehler bei der Vorgabe dieser Verläufe durch etwas höhere oder niedrigere Anpassparameter wieder auszugleichen.

Anpassung Kohlenstoff Bed. II ; — numerische Linienverläufe
+ experimentelle Linienverl.

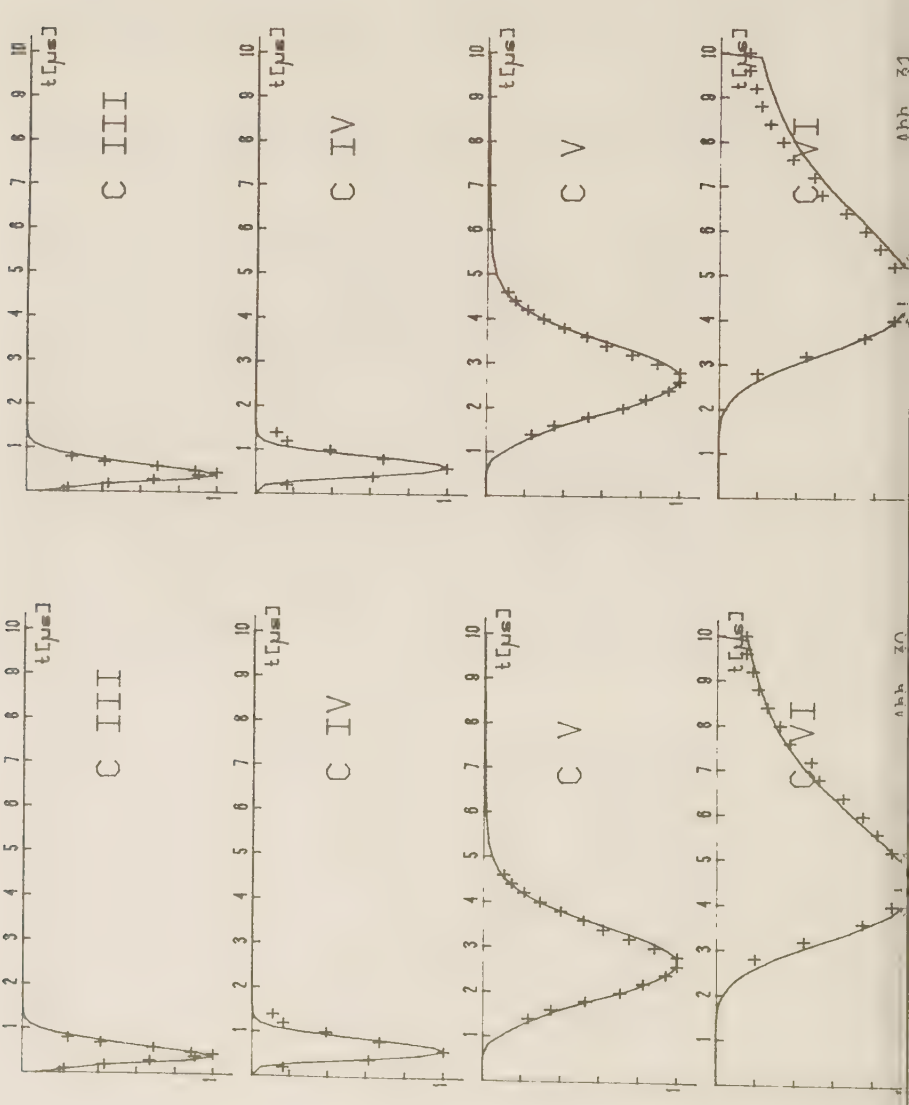



Abb. 31

Abb. 32

## 3.7 Ratenkoeffizienten

Als Ergebnis der beschriebenen Messungen erhielten wir für Bed. I 15 und für Bed. II 33 Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation diverser Ionen. Sie sind in Tabelle 9 a bzw. 9 b zusammengefaßt.

Die erste Spalte gibt die Ionisationsstufe an, die zweite Spalte einen typischen Zeitpunkt für das Auftreten des Ladungszustandes während der Entladung. In den nächsten beiden Spalten sind Elektronendichte und Temperatur für diesen Zeitpunkt aufgeführt und in der letzten Spalte schließlich steht der für diese Ionisationsstufe abgeleitete Ratenkoeffizient.
Die statistischen Fehlergrenzen ergeben sich aus der Genauigkeit bei der Bestimmung der Plasmaparameter und der Genauigkeit der Anpassung. Diese lag, wie oben schon erwähnt, in den meisten Fällen bei 20 %. Ausnahmen hiervon bilden nur die Ladungszustände O VII und Si XII. Hier bedurfte es einer Variation des Anpaßparameters um 50 %, bevor eine deutliche Änderung des Zeitverlaufs zu sehen war.
Zusammen mit einer Fehlergenauigkeit von ca. 20 % bei der Bestimmung der Plasmaparameter sollten die statistischen Fehlergrenzen der experimentellen effektiven Ratenkoeffizienten bei 30 % bzw. 50 % für O VII und Si XII liegen.

Die angegebenen 48 Ratenkoeffizienten stellen zur Zeit den größten Satz systematisch gemessener Werte dar und erlauben daher einen weitgehenden Vergleich mit verschiedenen theoretischen Ansätzen, die im nächsten Kapitel besprochen werden.

| Ion.-stufe | t ($\mu$s) | $N_e$ ($10^{16}$ cm$^{-3}$) | $T_e$ (eV) | $S_{ex}$ (cm$^3$ s$^{-1}$) |
|---|---|---|---|---|
| B IV | 2,5 | 1,2 | 140 | 1,6 -10 |
| C V | 4,0 | 1,6 | 160 | 4,4 -11 |
| N V | 1,8 | 0,9 | 110 | 4,4 -10 |
| O V | 2,0 | 1,0 | 120 | 6,5 -10 |
| O VI | 2,4 | 1,1 | 135 | 2,2 -10 |
| F V | 2,0 | 1,0 | 120 | 5,4 -10 |
| F VI | 2,5 | 1,2 | 140 | 2,7 -10 |
| F VII | 3,2 | 1,5 | 160 | 1,4 -10 |
| NeVI | 2,5 | 1,2 | 140 | 3,5 -10 |
| NeVII | 2,8 | 1,4 | 150 | 1,6 -10 |
| NeVIII | 4,0 | 1,6 | 160 | 5,1 -11 |
| ArVII | 1,8 | 0,9 | 110 | 6,1 -10 |
| ArVIII | 2,2 | 1,1 | 130 | 2,6 -10 |
| ArIX | 4,0 | 1,6 | 160 | 4,8 -11 |
| Ar X | 6,0 | 1,6 | 160 | 1,8 -11 |

Tab. 9a: Experimentelle Ionisationsratenkoeffizienten mit Plasmabedingung I gemessen

| Ion.-stufe | t (μs) | $\bar{n}_e$ ($10^{16}$ cm$^{-3}$) | $T_e$ (eV) | $S_{ex}$ (cm$^3$s$^{-1}$) |
|---|---|---|---|---|
| B IV | 2,4 | 1,5 | 175 | 2,0 -10 |
| B V | 3,6 | 2,4 | 230 | 5,3 -11 |
| C V | 3,1 | 2,0 | 210 | 7,5 -11 |
| C VI | 5,5 | 3,1 | 230 | 1,5 -11 |
| N V | 1,8 | 1,2 | 140 | 4,6 -10 |
| N VI | 4,5 | 2,6 | 235 | 2,4 -11 |
| O VI | 2,0 | 1,3 | 160 | 2,7 -10 |
| O VII | 6,0 | 3,2 | 230 | 8,7 -12 |
| F VI | 1,9 | 1,3 | 150 | 4,8 -10 |
| F VII | 2,5 | 1,6 | 180 | 1,4 -10 |
| NeVI | 1,8 | 1,2 | 140 | 3,8 -10 |
| NeVII | 2,3 | 1,5 | 170 | 1,9 -10 |
| NeVIII | 3,4 | 2,2 | 220 | 7,6 -11 |
| AlVII | 2,0 | 1,3 | 160 | 2,7 -10 |
| AlVIII | 2,4 | 1,5 | 175 | 1,7 -10 |
| Al IX | 3,4 | 2,1 | 220 | 6,3 -11 |
| Al X | 4,6 | 2,7 | 235 | 5,3 -11 |
| Al XI | 6,2 | 3,2 | 22[illegible] | [illegible] -11 |
| SiVIII | 2,5 | 1,5 | 180 | [illegible] -10 |
| Si IX | 3,2 | 2,0 | 220 | 1,2 -10 |
| Si X | 4,0 | 2,5 | 230 | 4,8 -11 |
| Si XI | 5,5 | 3,1 | 230 | 2,4 -11 |
| Si XII | 7,5 | 3,2 | 220 | 1,1 -11 |
| ArVIII | 2,0 | 1,3 | 160 | 2,7 -10 |
| Ar IX | 3,0 | 1,9 | 210 | 1,0 -10 |
| Ar X | 4,0 | 2,5 | 230 | 5,8 -11 |
| Ar XI | 5,8 | 3,1 | 230 | 2,5 -11 |
| Ti IX | 2,4 | 1,5 | 175 | 3,3 -10 |
| Ti X | 2,5 | 1,6 | 180 | 4,3 -10 |
| Ti XI | 3,0 | 1,9 | 210 | 1,5 -10 |
| Ti XII | 3,8 | 2,4 | 230 | 8,2 -11 |
| Kr IX | 2,3 | 1,5 | 170 | 2,3 -10 |
| Kr X | 2,7 | 1,7 | 190 | 2,[illegible] -10 |

Tab. 9b

# 4. THEORIE

## 4.1 Klassische Ansätze

Die theoretische Berechnung von Ionisationsratenkoeffizienten läßt sich gemäß Gl. 2 auf die Berechnung von Wirkungsquerschnitten für die Elektronenstoßionisation zurückführen.

Der erste Ansatz mit Hilfe des klassischen Hamiltonoperators geht auf Thomson zurück /62/. Unter der Annahme, daß das atomare Elektron ruht, während das stoßende Elektron die Energie $E_s = m_e v_s^2/2$ hat, berechnet sich nach der klassischen Stoßtheorie die übertragene Energie zu

$$\Delta E = (4 \cdot m_i m_e E_s/(m_i + m_e)^2) \sin^2(\theta/2) \qquad (39)$$

wobei $\theta$ der Winkel ist zwischen den Vektoren der Anfangs- und Endgeschwindigkeit des stoßenden Elektrons.
Der Wirkungsquerschnitt Q ergibt sich dann als Integral über den Stoßparameter R

$$Q = 2\pi \cdot \int_0^{R_{max}} R \cdot dR \qquad (40)$$

$R_{max}$ ist dadurch definiert, daß $\Delta E\ (R_{max})$ gerade gleich der Ionisationsenergie $E_i$ ist.

Hieraus berechnet sich der klassische Wirkungsquerschnitt zu

$$Q = (\pi \cdot e^4/E_s)(1/E_i - 1/E_s)\ cm^2 \qquad (41)$$

Durch Einführung des klassischen Bohr'schen Radius

$$a_o = h^2/(4 \cdot \pi^2 \cdot m_e \cdot e^2) \quad , \qquad (42)$$

der Ionisationsenergie von Wasserstoff

$$E_H = 2\pi^2 \cdot m_e \cdot e^4/h^2 = 13{,}56\ eV \quad , \qquad (43)$$

und der normierten Energie $u = E_s/E_i$ erhält man für $\nu$ gleichwertige Elektronen

$$Q = 4 \cdot \nu \cdot (E_H/E_i)^2 \; (1/u) \; (1-1/u) \cdot \pi a_o^2 \qquad (44)$$

Man sieht leicht, daß der sogenannte reduzierte Wirkungsquerschnitt

$$Q_r = Q \; (E_i/E_H)^2/(4 \cdot \nu) \qquad (45)$$

nur noch von u abhängt. Wenn man zudem noch in Einheiten des atomaren Wirkungsquerschnittes $\pi a_o^2 = 8{,}797 \cdot 10^{-17}$ cm$^2$ rechnet, bleibt nur eine einfache Funktion in u übrig. Diese eignet sich hervorragend für Vergleichszwecke, da man bei numerischen Rechnungen nur mit kleinen Zahlen zu operieren braucht.

Ansonsten beschreibt die klassische Theorie von Thomson die experimentellen Ergebnisse nur unvollständig, wie Abb. 32 für den einfachsten Fall der Elektronenstoßionisation von Wasserstoff im Grundzustand zeigt. Kurve 3 zeigt die Ergebnisse der Thomson-Theorie, Kurve 1 repräsentiert den Mittelwert aus experimentellen Messungen von Fite und Brackmann /63/, Boksenberg /64/ und Rothe et al. /65/. Nach der klassischen Theorie ist das Maximum bei u = 2, während es experimentell bei höheren Werten liegt. Auch wird das asymptotische Verhalten für große u nicht richtig wiedergegeben. Dieses geht, gemäß später noch zu diskutierenden quantenmechanischen Rechnungen, proportional zu $(\ln E_s)/E_s$ .

In einer Reihe von Arbeiten versuchte Gryzinski die klassische Theorie von Thomson zu verbessern /66/. Hierzu machte er eine Reihe physikalisch nicht begründbarer Annahmen über die Geschwindigkeit und die Geschwindigkeitsverteilungsfunktion des atomaren Elektrons. Die von ihm abgeleiteten Formeln für den reduzierten Wirkungsquerschnitt sind der Vollständigkeit halber im Anhang wiedergegeben.

Die beste Annäherung an die experimentellen Werte zeigt Kurve 2 in Abb. 32 .

Eine weitere Verbesserung erreichten Abrines et al. /67/ indem sie die klassischen Bewegungsgleichungen exakt aufintegrierten. Die ursprüngliche Geschwindigkeitsverteilung des atomaren Elektrons entnahmen sie jedoch schon quantenmechanischen Rechnungen von Fock /68/. Das Ergebnis zeigt Kurve 4 in Abb. 32 . Trotz der recht guten Übereinstimmung mit dem experimentellen Verlauf lassen die zu hohen Werte für niedrige Energien darauf schließen, daß Wechselwirkungsprozeße zwischen dem stoßenden und dem atomaren Elektron eine Rolle spielen.
Die Berücksichtigung dieser Effekte führt direkt zu quantenmechanischen Rechnungen.

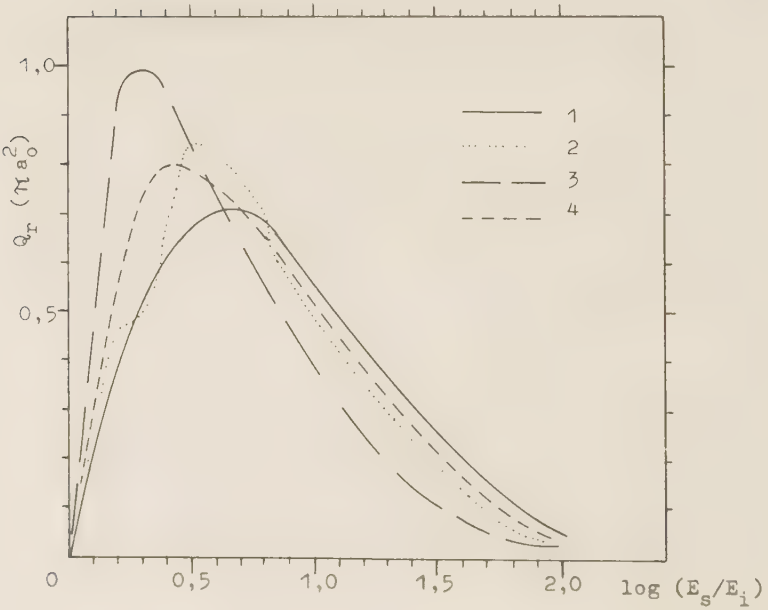



Abb. 32

## 4.2 Quantenmechanische Ansätze

Quantenmechanische Rechnungen gehen vom differentiellen Wirkungsquerschnitt $\sigma$ aus.

$$Q = \int_0^{E_{max}} \sigma(\epsilon, E_s)\, d\epsilon \qquad (46)$$

$E_s$ ist die Energie des einfallenden und $\epsilon$ die des herausgestoßenen Elektrons.

Da das herausgestoßene Elektron maximal die Energiedifferenz $E_s - E_i$ aufnehmen kann, gilt

$$\epsilon < E_s - E_i \quad \text{oder} \quad E_{max} = E_s - E_i \qquad (47)$$

Stoßendes und gestoßenes Elektron sind nach dem Stoß ununterscheidbar. Daher definiert man, das gestreute Elektron sei jenes mit der höheren Energie nach dem Stoßprozeß und das ionisierte jenes mit der niedrigeren Energie.
Einem Vorschlag von Rudge und Seaton /69/ folgend liefert eine bessere Näherung die obere Grenze:

$$E_{max} = (E_s - E_i)/2 \qquad (48)$$

Für atomaren Wasserstoff gestattet es diese Betrachtungsweise das gestreute, also schnellere Elektron nach dem Stoß durch eine ebene Welle zu beschreiben, da das langsamere Elektron das Kernfeld abschirmt.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt ist gegeben durch

$$\sigma(\epsilon, E_s) = (16 E_H/\pi E_s) \sum_{l_i, l_e, l_s} (2L + 1)\, J_{l_i, l_e, l_f}(\epsilon, E_s) \qquad (49)$$

wobei sich die Summe über alle Bahndrehimpulse $l_i$, $l_e$ und $l_f$ des einfallenden, gestreuten und herausgestoßenen Elektrons erstreckt. L ist der Drehimpuls des Gesamtsystems und daher eine Erhaltungsgröße.

Die Integrale $J_{l_i,l_e,l_f}$ zerfallen in einen direkten, einen Austausch- und einen Wechselwirkungsanteil, der sich aus den entsprechenden Streuamplituden f und g errechnet.

$$J_{l_i,l_e,l_f} = \sigma_d + \sigma_a + \sigma_{ww} = |f|^2 + |g|^2 - \alpha \cdot |f| \cdot |g| \qquad (50)$$

mit

$$f = \sum_k c_k \cdot \left\langle R_g R_i \left| \frac{1}{r_{12}} \right| R_e R_f \right\rangle$$

$$g = \sum_k c_k \cdot \left\langle R_g R_i \left| \frac{1}{r_{12}} \right| R_f R_e \right\rangle \qquad (51)$$

und dem Phasenfaktor $\alpha$ .

$R_g$, $R_i$, $R_e$ und $R_f$ sind die radialen Wellenfunktionen des gebundenen Systems, des einfallenden, ionisierten und gestreuten Elektrons. Die Vorfaktoren ergeben sich aus den Clebsch-Gordan-Koeffizienten und die Klammern $\langle\ \rangle$ entsprechen wie üblich den Radialintegralen.

Die Partialwellen schließlich sind Lösungen der radialen Schrödingergleichung

$$\left[d^2/dr^2 + l(l+1)/r^2 - 2\,V(r)\right] \cdot R_l(r) = \epsilon \cdot R_l(r) \qquad (52)$$

Um das Verfahren gemäß den Gleichungen 46 - 52 durchzuziehen muß man noch einige Annahmen machen. Hieraus ergeben sich verschiedene Näherungen, die in der Literatur mit bestimmten Namen verknüpft sind.

In der Born'schen Näherung werden einfallendes und gestreutes Elektron als ebene Welle angesetzt, d.h. $R_i$ und $R_f$ proportional zu exp(ikr) . Berechnet man die obere Integrationsgrenze nach Gl. 47 bzw. Gl. 48, so spricht man von Born (a) oder Born (b) Näherung. Der Austausch und der Wechselwirkungsterm werden vernachlässigt. Dies hat zur Folge, daß für niedrige Energien, insbesondere dort wo gestreutes und ionisiertes Elektron etwa die gleiche Energie besitzen ( $k_e^2 \simeq k_f^2$ ) , der Wirkungsquerschnitt zu groß berechnet wird /70/. Auch das Schwellwertverhalten wird nicht richtig wiedergegeben /71/. Für hohe Energien hingegen wird die Born'sche Näherung exakt und liefert das richtige asymptotische Verhalten.

Die Born-Oppenheimer Näherung versucht den Austauschterm explizit mitzunehmen, indem zur Wellenfunktion des gestreuten Elektrons eine kleine Störung addiert wird. Dann ist jedoch die Orthogonalitätsbedingung für die Wellenfunktionen verletzt, mit der Folge, daß zum Beispiel die Addition einer willkürlichen Konstanten zur Hamiltonfunktion -was physikalisch ohne Bedeutung ist- den Wirkungsquerschnitt drastisch ändern kann /72/. Die in dieser Näherung berechneten Werte für atomaren Wasserstoff fallen dementsprechend schlecht aus. Für positive Ionen sollen die Fehler jedoch geringer werden /73/. Dies zeigen auch Rechnungen für hoch ionisierten Sauerstoff von Malik und Trefftz /74/ für O V bzw. Trefftz /75/ für O VII.

Die Born-Exchange Näherung berücksichtigt die Austauschwechselwirkung ohne die Orthogonalitätsbedingung zu verletzen. Dies geschieht mittels eines Phasenfaktors $\eta$ , der die Austauschamplitude mit der direkten Streuamplitude verknüpft.

$$g_{be}(k_1,k_2) = \exp( i\cdot\eta\cdot(k_1,k_2)\, f_{Born}(k_2,k_1) ) \qquad (53)$$

Für $\eta(k_1,k_2)$ wurden in der Literatur schon verschiedene Ansätze gemacht /76,77,78/, keiner führte jedoch für das

Wasserstoffatom zu einer befriedigenden Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Dies deutet darauf hin, daß die Fehler der Born'schen Näherung durch den Phasenfaktor , der den Wert von $|g|^2 - \mathrm{Re}\,|f.g|$ bestimmt, nur teilweise kompensiert werden können.

Geht man von neutralen Atomen zu Ionen über, so wird das streuende bzw. gestreute Elektron nicht mehr vollständig durch das zu ionisierende bzw. ionisierte Elektron gegen die Kernladung abgeschirmt. Ein Ansatz mit ebenen Wellen ist dann nicht mehr möglich, sondern alle beteiligten Elektronen müßen nun durch Coulomb-Wellen beschrieben werden $R \sim \exp(ikr/r)$. **Diese Ansätze sind dann entsprechend als Coulomb-Born (a) und (b), Coulomb-Born-Oppenheimer und Coulomb-Born-Exchange Näherungen bekannt.**

Die Bethe-Näherung schließlich ist eine vereinfachte Version der Born'schen Näherung. Ihr Vorteil liegt darin, daß Aussagen für das asymptotische Verhalten möglich sind. Insbesondere gilt in dieser Näherung /79/

$$Q_{Bethe} = A \cdot \ln E_i / E_i + B/E_i \qquad (54)$$

Die Konstante A hängt nur von den optischen Eigenschaften des Atoms ab und läßt sich aus dem Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation P berechnen /80/

$$A = (E_H/\alpha \cdot \pi) \cdot \int_0^{\infty} \frac{P(\epsilon)}{E_i + \epsilon}\, d\epsilon \qquad (55)$$

$\epsilon$ ist die Energie des ionisierten Elektrons und $\alpha$ die Feinstrukturkonstante.
Die Konstante B hingegen enthält alle Vernachlässigungen, so daß man für eine genaue Berechnung von B den vollen quantenmechanischen Ansatz braucht. Daher wird der Term $B/E_i$ oft vernachlässigt und die absoluten Werte in der

Bethe-Näherung sind meist nicht sehr gut. Jedoch ergibt sich aus dem Zusammenhang mit den Photoionisationsquerschnitten P(W) eine einfache Beziehung, die es gestattet, unbekannte Ionisationsquerschnitte aus bekannten zu berechnen.

$$\frac{Q_A(E)}{Q_B(E)} = \frac{E_B \; P_A(0)}{E_A \; P_B(0)} \qquad (56)$$

$E_A$ und $E_B$ sind die Ionisationsenergien der Atomsorte A bzw. B.

Alle bisher gemachten Näherungen bezogen sich auf Wasserstoff oder wasserstoffähnliche Ionen. Rechnungen für komplexere Atome oder Ionen erfordern weitere Annahmen auf die später an Hand eines konkreten Beispiels eingegangen werden soll.

Die "distorted-wave" Näherung geht einen ganz anderen Weg zur Berechnung der Ionisationsquerschnitte komplexer Atome oder Ionen. Aufbauend auf einen Ansatz von Burke und Taylor /73/ ersetzt man bei der Berechnung der Wellenfunktionen aus der Schrödingergleichung (Gl. 52) die Coulomb-Potentiale $V_c = -(Z - N)/r$ durch selbstkonsistente Potentiale nach dem Hartree-Fock Verfahren /81,82/.

$$V_{HF} = -Z/r + \sum_{i=1}^{N} J_i(r) \qquad (57)$$

Hierbei ist $J_i(r) = \frac{1}{r} \cdot \int_0^r R_i^2(q)\, dq + \int_r^\infty \frac{R_i^2(q)}{q}\, dq$ (58)

mit den radialen Wellenfunktionen $R_i(q)$. Die Summation in i geht über alle Elektronen des Targetions.

Die Potentiale nach Gl.57/58 gelten für das einfallende und das gestreute (schnellere) Elektron. Für das herausgestoßene (langsamere) Elektron muß die Gesamtzahl der Elektronen des Targets N durch N-1 ersetzt werden.

Durch Einführung der selbstkonsistenten Felder reduziert sich das Mehrelektronenproblem auf ein Einelektronenproblem. Der Zustand des Atoms ergibt sich als Gesamtheit von Einelektronenzuständen und die Wellenfunktion des Atoms als Produkt von Einelektronenfunktionen. Hierdurch wird allerdings nur der Hauptanteil der Wechselwirkung zwischen den Elektronen berücksichtigt, denn die Produktfunktion weist in der Regel nicht die notwendige Symmetrie auf, um Korrelationen zwischen den Elektronen Rechnung zu tragen.

Es gibt noch eine Reihe anderer Ansätze /83 - 86/, die jedoch keine allgemeinere Bedeutung erlangt haben. Wir wollen statt dessen im nächsten Abschnitt die momentan aktuellsten theoretischen Rechnungen diskutieren.

## 4.3 Aktuelle theoretische Ansätze

Die ausführlichsten Rechnungen in quantenmechanischer Näherung liegen derzeit von Golden und Sampson /87-91/ bzw. Moores, Golden und Sampson /92,93/ vor. Sie fußen auf der Arbeit von Rudge und Schwartz /94/, die Coulomb-Born-Exchange Rechnungen für wasserstoffähnliche Ionen in der Näherung $Z \rightarrow \infty$ durchführten. Gemäß einem Vorschlag von Burgess, Hummer und Tully /95/ dient als Skalierungsgröße hierbei der Parameter $\beta = (Z-1)/Z$ , so daß $\beta = 1$ der Näherung $Z \rightarrow \infty$ entspricht und $\beta = 1/2$ wasserstoffähnlichem He II .

Die Ergebnisse der umfangreichen numerischen Rechnungen - Ionisationsquerschnitte für die Zustände 1s - 4f wasserstoffähnlicher Ionen mit $\beta = 1$ - liegen nur in tabellarischer Form vor, lassen sich aber durch folgenden Ausdruck approximieren

$$Q_{\infty}^{H}(nl,u) = (1/u)\left[a\cdot\ln u + b\cdot(1 - 1/u)^2 + (c/u + d/u^2)(1-1/u)\right] \qquad (59)$$

Die Koeffizienten a,b,c und d sind von der jeweiligen Schale nl abhängig und in den einzelnen Veröffentlichungen aufgelistet (vgl. Tab. 10). u ist die reduzierte Energie des stoßenden Elektrons $E_s/E_i(nl)$ und Q der reduzierte Wirkungsquerschnitt in Einheiten von $\pi a_o^2$ .

Die Approximation ist so gewählt, daß sie für große Energien ( $u \rightarrow \infty$ ) in die exakte Bethe-Form übergeht, d.h.

$$Q_{\infty\,Bethe}^{H}(nl,u) = (1/u)\cdot(a\cdot\ln u + b) \qquad (60)$$

Die Koeffizienten a und b sind daher keine echten Variablen der Approximation sondern lassen sich im Sinne der Bethe-Näherung aus atomaren Daten berechnen. Insbesondere ergibt

sich folgender Zusammenhang mit den Bethe-Koeffizienten A und B, die Omidvar /96/ berechnet hat :

$$a(nl) = A/n^2$$
$$b(nl) = (B - 2\cdot A\cdot \ln n)/n^2 \qquad (61)$$

Als effektive Anpaßparameter bleiben also im Prinzip nur c und d. Allerdings wird dieser Zusammenhang von Golden und Sampson nicht streng berücksichtigt. Um eine vernünftige Anpassung für den Energiebereich bis u = 6 zu erreichen, modifizieren sie in den späteren Arbeiten auch den Parameter b. Die Übereinstimmung der Approximationsformel mit den numerischen Werten ist dann in diesem Bereich stets besser als 2 %. Den letzten Stand der Koeffizienten a,b, c und d gibt Tab. 10 wieder.

Die Approximationsfunktion (Gl. 59) hat den weiteren Vorteil, daß sie sich leicht über eine Maxwell'sche Geschwindigkeitverteilung integrieren läßt, so daß man für die Ionisationsraten erhält :

$$S_\infty^H(nl,y) = (8\cdot kT_e/\pi m_e)^{1/2} y \left\{ b\cdot e^{-y} - y\cdot d\cdot E_3(y) + \left[a + y(c-2b)\right] E_1(y) + y(b+d-c)E_2(y) \right\} \qquad (62)$$

in Einheiten von $\pi a_o^2$ ; mit $y = E_i(nl)/kT_e$ und den Exponentialintegralen $E_1, E_2$ und $E_3$ .

Zur Berechnung der Ionisationsquerschnitte bzw. Raten für komplexe, d.h. nicht wasserstoffähnliche Ionen mit endlichem Z gehen Golden und Sampson auf die Definition des reduzierten Wirkungsquerschnitts zurück (vgl. Gl. 45) und machen von der Tatsache Gebrauch, daß für $Z \to \infty$ gilt:

$$E_H/E_i(nl) = (n/Z)^2 \qquad (63)$$

So kommen sie für komplexe Ionen mit endlichem Z zu der Näherung

$$Q(nl,u) = (n/Z_{eff}(nl))^4 \nu(nl)\, Q_{\infty}^{H}(nl,u)\cdot \pi a_o^2 \qquad (64)$$

wobei $Z_{eff}$ eine effektive Ladungszahl darstellt, die für alle nicht wasserstoffähnlichen Ionen der Abschirmung durch die "Rumpfelektronen" Rechnung tragen soll. $\nu(nl)$ ist die Anzahl der gleichwertigen Elektronen in der Schale nl .

Wie die Autoren selbst anmerken / 92/ kann man in gleicher Näherung allerdings auch schreiben

$$Q(nl,u) = (n/Z_{eff})^2 (E_H/E_i(nl))\cdot \nu \cdot Q_{\infty}^{H}(nl,u)\cdot \pi a_o^2 \qquad (65)$$

Man nutzt damit die Beziehung (63) nur teilweise aus, erhält jedoch etwas hohere Werte für die Querschnitte als nach Gl. 64 , da Gl. 63 für komplexe Ionen normalerweise nicht exakt erfüllt ist. Wir kommen auf diesen Unterschied beim Vergleich der experimentellen Werte mit den theoretischen noch zurück.

Auch die effektive Kernladung bedarf noch einer gewissen Interpretation. In frühen Arbeiten /97/ galt

$$Z_{eff} = Z - N + 1 \qquad (66)$$

wobei N die Zahl der gebundenen Elektronen des Ions ist.

Später tabellarisch angegebene Werte für $Z_{eff}(nl)$ wurden dann letztendlich wieder revidiert zu Gunsten einer Berechnung mit Hilfe der Abschirmkonstanten von Mayer /98/. Gemäß dieser Theorie ist die Abschirmung,die ein Elektron im Niveau nl durch ein Elektron im Zustand n'l' erfährt,

| nl | [illegible] | b(nl) | c(nl) | [illegible] | [illegible] |
|---|---|---|---|---|---|
| [illegible] | [illegible] | 4,[illegible] | [illegible] | [illegible],30 | /[illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| 2p | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | /[illegible]2,[illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible]2,10[illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible],38 | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| 3d | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible],65 | /[illegible]/ |
| 4s | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | /[illegible]/ |
| 4p | [illegible] | 4,28 | 1,87 | 1,68 | /91/ |
| 4d | [illegible] | [illegible],90 | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| [illegible] | [illegible] | 6,21 | [illegible] | [illegible] | [illegible]91/ |

Tab. 10

| Isoelectronic Sequence | Ions | Reference |
|---|---|---|
| Hydrogen | He II, C VI, Ne X, H I | Phys. Rev. A 22, 111 (1980) |
| Helium | Li II, B IV, N VI, Na X, He I | Phys. Rev. A 22, 1425 (1980 |
| Lithium | Be II, O VI, Mg X, Li I | Phys. Rev. A 22, 111 (1980) |
| Beryllium (including 2s2p $^3P$) | C III, N IV, O V, F VI, Ar XV | Unpublished |
| Fluorine | Ne II, Na III | Unpublished |
| Neon | Na II, Mg III, Al IV, Ar IX | Phys. Rev. A 23, 1138 (1981 |
| Sodium | Mg II, Al III, P V, Ar VIII | Phys. Rev. A Sept.1981 |
| Miscellaneous | Zn II, K II, Ar II, Kr I, Fe XVIII - XXII | Unpublished |

Tab. 12

gegeben durch

$$\delta_{nl,n'l'} = n^2 \cdot F^0(nl,n'l') \,. \qquad (67)$$

$F^0(nl,n'l')$ ist das entsprechende Slaterintegral.

Die Totalabschirmung berechnet sich aus der Summe über alle Elektronen

$$\delta_{nl}^{t} = \sum_{n'l'} \delta_{nl,n'l'} \qquad (68)$$

so daß

$$Z_{eff}(nl) = Z - \delta_{nl}^{t} \qquad (69)$$

Zur Berechnung der Ionisationsquerschnitte erhöhen Golden und Sampson die so berechnete effektive Kernladung jedoch noch um eine heuristische additive Konstante, die 0,13 beträgt für heliumähnliche Ionen mit $nl < 3d$ , 0,10 für heliumähnliche mit $nl \geq 3d$ und 0,4 für alle anderen nicht wasserstoffähnlichen Ionen. Daraus ergeben sich nun die Größen $\Delta Z_{eff} = Z - Z_{eff}(nl)$, die in Tab. 11 für verschiedene isoelektronische Sequenzen und die Elektronenkonfigurationen von 1s - 4f angegeben sind.

Diese Werte sind wie folgt zu gebrauchen: Wird in einem Fluor-ähnlichen Ion ein Elektron aus der 3p Schale ionisiert, so ist zur Berechnung des entsprechenden Ionisationsquerschnittes nach den Formeln (64) und (65) die Kernladung Z des Ions um $\Delta Z_{eff} = 6{,}56$ zu vermindern.

Aus den gemachten Annahmen folgt, daß die Rechnungen von Golden und Sampson um so besser werden, je wasserstoffähnlicher die Ionen sind, d.h. je größer das Verhältnis Z/N wird. Die Autoren geben als Grenze $Z/N \simeq 2$ an, bei einer Genauigkeit von [illegible].

| | | 1s | 2s | 2p | 3s | 3p | 3d | 4s | 4p | 4d | 4f |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| H | $1s$ | 0. | 0. | 0. | 0. | 0. | 0. | 0. | 0. | 0. | 0. |
| Be | $1s^2$ | 0.5 | 0.7 | 0.85 | 0.95 | 0.95 | 0.9 | 0.95 | 0.985 | 0.9 | 0.9 |
| Li | $1s^2 2s$ | 0.44 | 1.3 | 1.34 | 1.4 | 1.55 | 1.6 | 1.44 | 1.57 | 1.6 | 1.6 |
| Be | $1s^2 2s^2$ | 0.65 | 1.3 | 1.15 | 2.15 | 2.2 | 2.5 | 2.27 | 2.47 | 2.54 | 2.6 |
| B | $1s^2 2s^2 2p$ | 0.9 | 1.5 | 2.03 | 2.9 | 3.1 | 3.45 | 3.1 | 3.5 | 3.5 | 3.6 |
| C | $1s^2 2s^2 2p^2$ | 1.19 | 3.2 | 3.5 | 3.7 | 3.95 | 4.4 | 3.93 | 4.2 | 4.45 | 4.58 |
| N | $1s^2 2s^2 2p^3$ | 1.55 | 3.85 | 4.25 | 4.5 | 4.87 | 5.35 | 4.74 | 5.07 | 5.45 | 5.58 |
| O | $1s^2 2s^2 2p^4$ | 1.6 | 4.5 | 5.0 | 5.25 | 5.6 | 6.2 | 5.6 | 5.96 | 6.35 | 6.56 |
| F | $1s^2 2s^2 2p^5$ | 1.85 | 5.15 | 5.7 | 6.05 | 6.4 | 7.1 | 6.4 | 6.9 | 7.35 | 7.57 |
| Ne | $1s^2 2s^2 2p^6$ | 2.1 | 5.8 | 6.45 | 6.9 | 7.4 | 8.05 | 7.35 | 7.94 | 8.4 | 8.59 |
| Na | $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ | 2.1 | 6.1 | 6.8 | 7.5 | 8.3 | 9.2 | 8.12 | 8.62 | 9.27 | 9.59 |
| Mg | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ | 2.4 | 6.45 | 7.15 | 8.1 | 8.87 | 9.85 | 8.84 | 9.4 | 10.1 | 10.5 |
| Al | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$ | 2.4 | 6.8 | 7.5 | 8.38 | 9.3 | 10.5 | 9.6 | 10.1 | 10.9 | 11.4 |
| Si | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$ | 2.5 | 7.15 | 7.9 | 8.9 | 10.1 | 11.2 | 10.2 | 10.9 | 11.7 | 12.2 |
| P | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$ | 2.65 | 7.55 | 8.4 | 10.1 | 10.8 | 11.9 | 11.0 | 11.6 | 12.5 | 13.2 |
| S | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ | 2.75 | 7.9 | 8.7 | 10.7 | 11.4 | 12.6 | 11.8 | 12.4 | 13.4 | 14.1 |
| Cl | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$ | 2.85 | 8.25 | 9.0 | 11.4 | 12.1 | 13.4 | 12.5 | 13.2 | 14.1 | 15.0 |
| Ar | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ | 2.95 | 8.6 | 9.4 | 11.9 | 12.7 | 14.0 | 13.2 | 13.9 | 14.9 | 15.9 |

Tab. 11

Tab. 11 Fortsetzung

| | | 1s | 2s | 2p | 3s | 3p | 3d | 4s | 4p | 4d | 4f |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| K | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d$ | 3.08 | 9.0 | 9.9 | 12.6 | 13.4 | 14.7 | 13.9 | 14.7 | 15.8 | 16.8 |
| Ca | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2$ | 3.18 | 9.4 | 10.3 | 13.0 | 14.1 | 15.5 | 14.7 | 15.5 | 16.6 | 17.8 |
| Sc | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^3$ | 3.3 | 9.9 | 10.7 | 13.9 | 14.8 | 16.2 | 15.5 | 16.3 | 17.5 | 18.7 |
| Ti | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4$ | 3.4 | 10.3 | 11.1 | 14.5 | 15.5 | 17.0 | 16.2 | 17.0 | 18.4 | 19.7 |
| V | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5$ | 3.5 | 10.7 | 11.6 | 15.0 | 16.2 | 17.8 | 17.0 | 17.8 | 19.3 | 20.6 |
| Cr | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^6$ | 3.6 | 11.1 | 12.0 | 15.9 | 16.9 | 18.6 | 17.7 | 18.5 | 20.0 | 21.6 |
| Mn | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^7$ | 3.7 | 11.5 | 12.4 | 16.5 | 17.6 | 19.3 | 18.5 | 19.4 | 20.9 | 22.5 |
| Fe | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^8$ | 3.8 | 11.9 | 12.8 | 17.2 | 18.3 | 20.1 | 19.2 | 20.2 | 21.7 | 23.4 |
| Co | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^9$ | 3.9 | 12.3 | 13.3 | 17.8 | 19.0 | 20.9 | 20.0 | 21.0 | 22.6 | 24.4 |
| Ni | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ | 4.1 | 12.8 | 13.7 | 18.5 | 19.7 | 21.7 | 20.8 | 21.8 | 23.4 | 25.4 |
| Cu | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s$ | 4.1 | 13.0 | 13.9 | 18.9 | 20.1 | 22.1 | 21.5 | 22.5 | 24.3 | 26.3 |
| Zn | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$ | 4.2 | 13.2 | 14.1 | 19.4 | 20.5 | 22.5 | 22.1 | 23.1 | 24.9 | 27.0 |
| Ga | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s 4p$ | 4.2 | 13.4 | 14.3 | 19.7 | 20.9 | 22.9 | 22.7 | 23.8 | 25.7 | 27.7 |
| Ge | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s 4p^2$ | 4.3 | 13.6 | 14.5 | 20.1 | 21.3 | 23.4 | 23.3 | 24.4 | 26.3 | 28.4 |
| As | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$ | 4.4 | 13.8 | 14.8 | 20.6 | 21.8 | 23.8 | 23.9 | 25.0 | 26.8 | 29.0 |
| Se | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^4$ | 4.4 | 14.1 | 15.0 | 21.0 | 22.2 | 24.3 | 24.5 | 25.6 | 27.5 | 29.7 |
| Br | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^5$ | 4.5 | 14.3 | 15.2 | 21.4 | 22.6 | 24.7 | 25.2 | 26.2 | 28.1 | 30.4 |
| Kr | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s 4p^6$ | 4.6 | 14.5 | 15.4 | 21.8 | 23.1 | 25.2 | 25.8 | 26.9 | 28.8 | 31.1 |

In jüngster Zeit erschienen auch Rechnungen in der "distorted-wave" Approximation. Für wasserstoff- und lithiumähnliche Ionen /99/, sowie heliumähnliche Ionen /100/ gilt das oben beschriebene Verfahren, wobei zur Berechnung der selbstkonsistenten Potentiale $J_i(r)$ nach Gl. 58 die Wellenfunktionen von Clementi und Roetti /101/ verwandt werden.

Für neonähnliche /102/ sowie beryllium- und natriumähnliche Ionen /103/ wird jedoch das elektrostatische Potential $V_{HF}$ (vgl. Gl. 57) durch ein energieabhängiges semiklassisches Austauschpotential $V_{SCE}$ modifiziert

$$V_{SCE} = (V_{HF} - E_s)/2 + \sqrt{(E_s - V_{HF})^2 + \gamma^2}/2 \qquad (70)$$

wobei $E_s$ wieder die Energie des einfallenden Elektrons in Rydberg und $\gamma$ sich aus der Summation über die radialen Wellenfunktionen $R_i(r)$ ergibt.

$$\gamma = (4/r^2) \cdot \sum_{i=1}^{N} (R_i(r))^2 \qquad (71)$$

Für $\gamma << (E_s - V_{HF})$ geht dieses Potential gegen Null. Ansonsten soll es die Phasenverschiebungen kompensieren, die bei Hartree-Fock Rechnungen für komplexe Ionen auftreten/104/.

Außer den genannten isoelektronischen Sequenzen existieren noch Berechnungen für andere atomare Systeme, die bisher noch nicht veröffentlicht worden sind. Einen Überblick über den aktuellen Stand gibt Tab. 12, die von S.M. Younger freundlicherweise zur Verfügung gestellt wurde.

Ähnlich wie bei Golden und Sampson lassen sich die tabellarischen numerischen Ergebnisse wieder durch einen analytischen Ausdruck approximieren.

$$Q = (1/uE_i^2)\cdot\left[A(1-1/u) + B(1-1/u)^2 + C\cdot\ln u + (D/u)\cdot\ln u\right] \quad (72)$$

A, B, C und D sind Z-abhängige Parameter.

$$A = \sum_{i=0}^{3} a_i/(Z-N+1)^i \; ; \; B = \sum_{i=0}^{3} b_i/(Z-N+1)^i \quad \text{usw.} \quad (73)$$

$a_i$, $b_i$, $c_i$ und $d_i$ sind schalenabhängig und, soweit bisher zugänglich in Tab. 13 zusammengefaßt.

Die Approximation ist wiederum so gewählt, daß sie für $u \to \infty$ in die Bethe-Form übergeht; C ist daher ein Bethe-Koeffizient und läßt sich im Prinzip auch nach Gl. 55 bestimmen.

Für neonähnliche Ionen war eine solche Anpassung nicht möglich /105/.

Gleichung 72 läßt sich analytisch über eine Maxwellverteilung integrieren. Man erhält dann für die Ionisationsraten einen Ausdruck, der sich als Korrektur zur semiempirischen Formel von Seaton /106/ schreiben läßt.

$$S = F(y)\, S_{Seaton} \quad (74)$$

$$S_{Seaton} = 2{,}2\cdot10^{-6}\cdot y^{0{,}5}\cdot E_i^{-1{,}5}\cdot e^{-1/y} \quad cm^3 s^{-1} \quad (75)$$

$E_i$ in eV; $y = kT_e/E_i$ .

$$F(y) = (3{,}0\cdot10^{13}/y)\left\{\left[A+B(1+1/y)\right] + \left[C-(A+2B+B/y)/y\right]\cdot\alpha(y) + (D/y)\cdot\beta(y)\right\} \quad (76)$$

$$\alpha(y) = \frac{0{,}001193 + 0{,}9764y + 0{,}6604y^2 + 0{,}02590y^3}{1{,}0 + 1{,}488y + 0{,}2972y^2 + 0{,}004925y^3} \quad (77)$$

$$\beta(y) = \frac{-0{,}0005725 + 0{,}01345y + 0{,}8691y^2 + 0{,}03405y^3}{1{,}0 + 2{,}197y + 0{,}2454y^2 + 0{,}002053y^3} \quad (78)$$

| Sequenz | | n = 0 | n = 1 | n = 2 | n = 3 |
|---|---|---|---|---|---|
| H - ähnlich | $a_n$ | [illegible] | -30,[illegible] | 171,0 | -213,0 |
| $1s \rightarrow e^-$ | $b_n$ | [illegible] | 30,5 | [illegible] | [illegible] |
| | $c_n$ | 1,54 | 0,0 | 0,0 | 0,0 |
| | $d_n$ | -10,[illegible] | [illegible] | -155,0 | [illegible] |
| He- ähnlich | $a_n$ | 27,0 | -71,2 | 228,0 | -233,0 |
| $1s^2 \rightarrow 1s + e^-$ | $b_n$ | -9,01 | 31,0 | -66,0 | 29,9 |
| | $c_n$ | 3,09 | 5,33 | -10,6 | 12,4 |
| | $d_n$ | -21,7 | 51,5 | -203,0 | [illegible] |
| Li-ähnlich | $a_n$ | 0,06 | [illegible] | 0,28 | 0,566 |
| $1s^22s$ | $b_n$ | -2,47 | [illegible] | -16,7 | 23,1 |
| $\rightarrow 1s^2 + e^-$ | $c_n$ | 1,44 | -0,0529 | 0,703 | -3,37 |
| | $d_n$ | -5,3[illegible] | -11,[illegible] | 7,[illegible] | 7,51 |
| | $a_n$ | 27,0 | -61,[illegible] | 148,0 | -13,2 |
| $1s2s^2 \rightarrow$ | $b_n$ | -9,61 | 26,6 | -32,2 | -79,2 |
| $1s2s + e^-$ | $c_n$ | 3,69 | 15,8 | -21,0 | -73,2 |
| | $d_n$ | -21,7 | 42,5 | -110,0 | -29,0 |
| Be- ähnlich | $a_n$ | 20,8 | -36,4 | -18,3 | 448,0 |
| $1s^22s^2 \rightarrow$ | $b_n$ | -6,78 | 35,9 | -43,2 | -210,0 |
| $1s^22s + e^-$ | $c_n$ | 2,68 | -1,29 | 24,1 | -65,3 |
| | $d_n$ | -13,1 | 17,0 | 9,45 | -359,0 |
| | $a_n$ | 13,2 | 18,7 | -116,0 | -271,0 |
| $1s^22s2p \rightarrow$ | $b_n$ | -4,14 | -10,6 | 70,3 | -139,0 |
| $1s^22s + e^-$ | $c_n$ | 0,369 | 1,61 | -3,06 | [illegible] |
| | $d_n$ | [illegible] | -34,9 | [illegible] | [illegible] |
| | $a_n$ | [illegible] | 34,[illegible] | [illegible] | [illegible] |
| $1s^22s3s \rightarrow$ | $b_n$ | -2,47 | -15,[illegible] | 44,4 | -21,[illegible] |
| $1s^22s + e^-$ | $c_n$ | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| | $d_n$ | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |

Tab. 13

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Na-ähnlich | $a_n$ | 9,86 | -30,1 | 92,4 | -92,3 |
| $1s^2 2s^2 2p^6 4s$ | $b_n$ | -3,2 | 13,4 | -69,7 | 75,5 |
| $\rightarrow 2p^6 + e^-$ | $c_n$ | 1,06 | -1,39 | -2,05 | 5,29 |
| | $d_n$ | -5,65 | 7,69 | -47,6 | 54,5 |
| | $a_n$ | 79,1 | 23,3 | -463,0 | 670,0 |
| | $b_n$ | -24,1 | -62,5 | 422,0 | -644,0 |
| $2p \rightarrow e^-$ | $c_n$ | 5,18 | 96,8 | -203,0 | 170,0 |
| | $d_n$ | -44,6 | -158,0 | 416,0 | -463,0 |
| | $a_n$ | 18,1 | 95,5 | -444,0 | 538,0 |
| | $b_n$ | -4,95 | -64,3 | 324,0 | -403,0 |
| $2s \rightarrow e^-$ | $c_n$ | 2,68 | 5,28 | -13,7 | 10,5 |
| | $d_n$ | -10,7 | -118,0 | 433,0 | -497,0 |

| | | |
|---|---|---|
| Fe XVII - XXVI | | |
| $1s^2 2s^2 2p^n \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^{n-1} + e^-$ | A = | 8,40 · n |
| | B = | -2,68 · n |
| | C = | 0,672 · n |
| | D = | -5,08 · n |
| $1s^2 2s^2 2p^n \rightarrow 1s^2 2s 2p^n + e^-$ | A = | 11,8 |
| | B = | -3,27 |
| | C = | 1,64 |
| | D = | -7,58 |
| $1s^2 2s^2 2p^n \rightarrow$ [illegible] | A = | [illegible] |
| | B = | [illegible] |
| | C = | [illegible] |
| | D = | [illegible] |

alle Koeffizienten in Einheiten von [illegible]

Tab. 13 Fortsetzung

## 4.4 Empirische Ansätze

Außer den bisher besprochenen Ansätzen gibt es noch eine Reihe mehr oder weniger gebräuchlicher empirischer Formeln. Diejenigen von Kunze/11/ (Gl. 7) und Seaton /106/ (Gl. 75) sind schon aufgeführt. Im folgenden sollen noch zwei weitere, häufig gebrauchte Ausdrücke diskutiert werden. Andere, weniger gebräuchliche Formeln sind im Anhang aufgeführt. Einen Vergleich empirischer Ansätze mit quantenmechanischen Rechnungen und experimentellen Ergebnissen stellte T. Kato an /107/.

Der wohl am häufigsten verwendete analytische Ausdruck stammt von W. Lotz /109/.

$$Q = \sum a_i \cdot \gamma_i \cdot \ln(E_s/E_i)/(E_s\, E_i)\left\{1 - b_i \exp\left[-c_i(E_s/E_i - 1)\right]\right\} \tag{79}$$

Die verwendete Form mit drei freien Parametern pro Schale paßt sich in ihrem asymptotischen Verhalten den Rechnungen von Bethe bzw. Rudge und Schwartz /94/ an. Die Summation erfolgt über alle Schalen des Atoms oder Ions.

Die individuellen Konstanten $a_i$, $b_i$ und $c_i$ bestimmte Lotz durch Anpassung an die zur damaligen Zeit vorliegenden experimentellen Werte /110/. Im wesentlichen waren dies Daten für neutrale Atome und einfach geladene Ionen. Eine Zusammenstellung findet sich bei Kieffer und Dunn /111/. Die Konstante $a_i$ lag hierbei stets zwischen $1{,}8 \cdot 10^{-14}$ cm$^2$ eV$^2$ und $4{,}5 \cdot 10^{-14}$ cm$^2$ eV$^2$, wenn $E_s$ und $E_i$ in eV und Q in cm$^2$ angegeben werden.

Für mehr als zweifach geladene Ionen lagen damals noch keine experimentellen Wirkungsquerschnitte vor, so daß Lotz die entsprechenden Parameter durch "vernünftiges Raten" extrapolieren mußte /112/. Für vierfach und höher

geladene Ionen schließlich setze er für $a_i$ den maximalen Wert von $4,5 \cdot 10^{-14}$ $cm^2$ $eV^2$ an und $b_i = c_i = 0$. Hierdurch reduziert sich Gl. 79 für alle Schalen zu:

$$Q_i = 4,5 \cdot 10^{-14} \cdot \nu_i \cdot \ln(E_s/E_i)/(E_s \cdot E_i) \qquad (80)$$

oder als reduzierter Querschnitt in Einheiten von $\pi a_o^2$ :

$$Q_r = (2,77 \cdot \ln u)/u \; . \qquad (81)$$

Die Bedeutung, die die Lotz'sche Werte gewonnen haben, beruht einerseits auf der Einfachheit des analytischen Ausdrucks 81, andererseits auf der ausführlichen Dokumentation der Wirkungsquerschnitte und Ratenkoeffizienten für alle Ionisationsstufen der Elemente Wasserstoff bis Zink im Temperaturbereich von 1 eV bis 10 keV /113/.

Dabei ist oft in Vergessenheit geraten, daß insbesondere der Faktor $4,5 \cdot 10^{-14}$ für höherionisierte Ionen rein empirisch gewonnen wurde. Seine Konstanz für alle Ionensorten und Ladungszustände ist daher nicht viel mehr als eine Arbeitshypothese. U.B. Mann hingegen kommt bei einem Vergleich experimenteller Daten aus "crossed-beam" Experimenten mit den Lotz'schen Werten zu der Schlußfolgerung, daß letztere im Mittel um 10 - 20 % zu hoch liegen, und daher der Faktor $a_i$ auf $4,0 \cdot 10^{-14}$ $cm^2$ $eV^2$ zu reduzieren sei /114/. Auch dann streut das Verhältnis $Q_{Lotz}/Q_{exp}$ noch relativ stark um den Mittelwert 1,0 (vgl. Abb. 33).

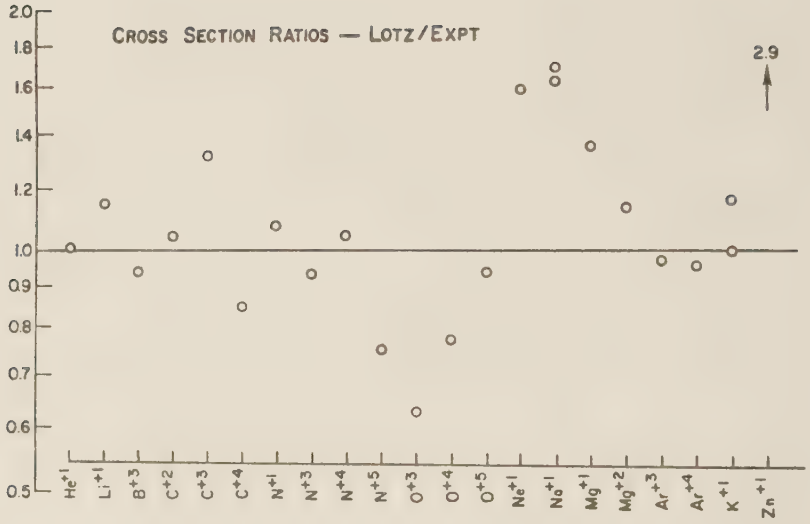



Abb. 33 (aus Ref. /114/)

Beim "exchange-classical impact parameter" Modell von Burgess (ECIP) wird der Gesamtwirkungsquerschnitt aus zwei Summanden zusammengesetzt.

$$Q_{ECIP} = Q_{EC} + Q_{IP} \tag{82}$$

Der EC - Anteil, für kleine Stoßparameter, errechnet sich aus der Theorie für binäre Stöße unter Berücksichtigung der Austauschwechselwirkung /115/.

$$q_{EC} = (4\, r_i/E_s)\left\{(1/E_i - 1/E_s) + \frac{2}{3} E_k(1/E_i^2 - 1/E_s^2) - \ln(E_s/E_i)/(E_s+E_i)\right\} \tag{83}$$

in Einheiten von $\pi a_o^2$ .

Der letzte Term in der geschweiften Klammer entspricht dabei dem Interferenzterm für Coulombstreuung identischer Teilchen in der Mott-Formel /116/.

Der Anteil für große Stoßparameter wird semiklassisch behandelt, d.h. in einem Störungsansatz mit klassischem Orbital für das streuende Elektron /117/. Man kann ihn darstellen als ein Integral über den Photoionisationswirkungsquerschnitt P :

$$Q_{IP} \equiv (2 \cdot E_H / \pi \cdot \alpha \cdot E_s) \int_0^{E_s - E_i} g \cdot P(E_e) / (E_i + E_e) \; dE_e \qquad (84)$$

$E_e$ ist die Energie des ionisierten Elektrons.

Der semiklassische Gauntfaktor g ist bei Burgess und Summers /118/ tabelliert.
$Q_{IP}$ trägt typischerweise 20 % zum totalen Wirkungsquerschnitt bei.

Obwohl die ECIP - Werte oft mit experimentellen Ratenkoeffizienten gut übereinstimmen /119/, sind sie recht ungebräuchlich. Dies liegt nicht zuletzt an dem relativ großen Aufwand, der zu ihrer Berechnung nötig ist, und der eine schnelle Abschätzung sowie den Einbau in numerische Programme erschwert.

Wir haben zu Vergleichszwecken eine Berechnungsvorschrift von Summers /120/ in ein EDV-Programm umgesetzt, das im Anhang zu finden ist.

## 5. DISKUSSION DER ERGEBNISSE

Zur Diskussion der Meßergebnisse und beim Vergleich mit theoretischen Rechnungen bietet es sich an, anhand isoelektronischer Sequenzen vorzugehen (vgl Tab. 7). Die Besonderheiten der einzelnen atomaren Systeme können so am besten berücksichtigt werden. Außerdem reduziert sich die Fülle der experimentellen Daten hierdurch auf eine jeweils überschaubare Menge.

Im Anschluß an den Vergleich mit der Theorie wollen wir noch einige atomphysikalische Prozesse in Hochtemperaturplasmen diskutieren, sowie deren Einfluß auf die plasmaspektroskopische Methode.

### 5.1 Wasserstoffähnliche Ionen

Mit der Bestimmung der Ionisationsraten von Bor V und Stickstoff VII gelang es zum erstenmal Ratenkoeffizienten wasserstoffähnlicher Ionen mit $Z > 4$ zu messen. Für diese isoelektronische Sequenz gelten die theoretischen Rechnungen als gesichert, insbesondere wenn $Z \gg N$, bzw. $\beta = (Z-1)/Z \rightarrow 1$ gilt. Ein Vergleich der verschiedenen Ansätze über einen gewissen Temperaturbereich zeigt, daß die Abweichungen untereinander minimal sind (Abb. 34).

Die Bestimmung experimenteller Ionisationsratenkoeffizienten wasserstoffähnlicher Ionen ist somit gewissermaßen ein Test für die Zuverlässigkeit der plasmaspektroskopischen Methode an sich, sowie für die Brauchbarkeit der vorliegenden Plasmabedingungen insbesondere.

Tab. 14 zeigt die Meßergebnisse im Vergleich zu den Werten der momentan gebräuchlichsten Theorien. Die Übereinstimmung ist sehr gut, die Abweichungen liegen bei maximal 10 %.

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $N_e$ ($10^{16}$ cm$^{-3}$) | Ionisationsraten Lotz | ECIP | GS | Y | Exp. |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| B V | [illegible] | 0.68 | [illegible] | 6.0 | [illegible] | 5.8 | 5.3 | 5.3 |
| C VI | [illegible] | 0.47 | [illegible] | 1.6 | 1.5 | 1.6 | 1.4 | 1.5 |

Tab. 14 : Ionisationsratenkoeffizienten wasserstoffähnlicher Ionen in Einheiten von $10^{-11}$ cm$^3$ s$^{-1}$ .

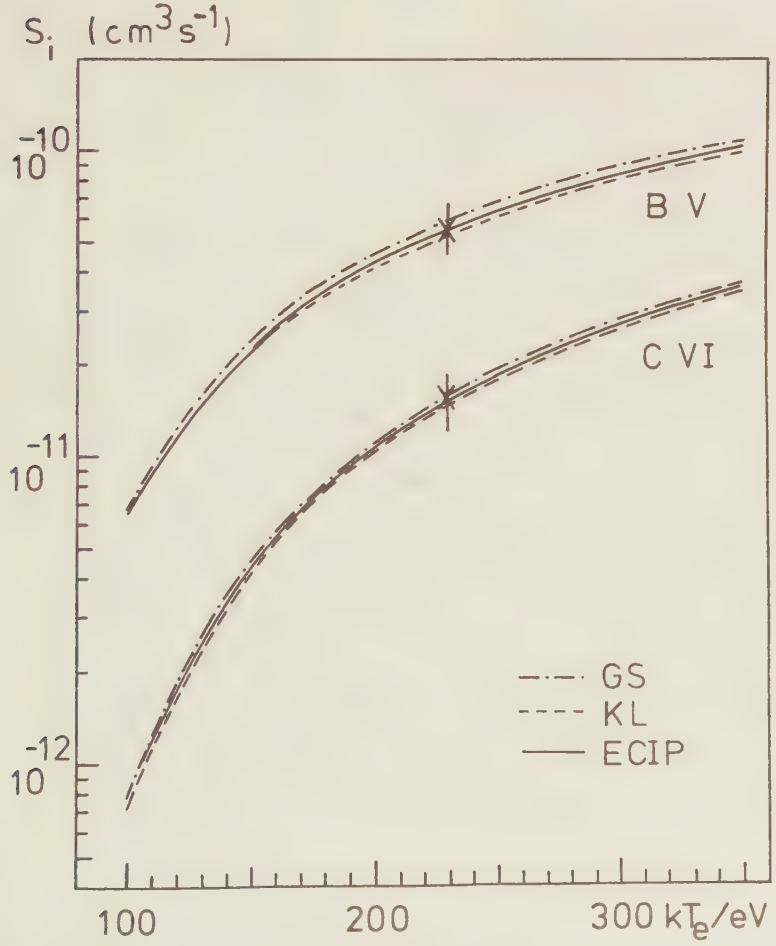



Abb. 34

## 5.2 Heliumähnliche Ionen

Heliumähnliche Ionen zeichnen sich durch ihr energetisch hoch gelegenes, metastabiles $2\,^3S$ Niveau aus. Abhängig von den Plasmaparametern kann dieser Zustand eine recht hohe Besetzungsdichte aufweisen und damit deutlich zur effektiven Ionisationsrate beitragen. Folgt man der Schreibweise der Literatur /122,123,124/, so läßt sich der effektive Ratenkoeffizient wie folgt schreiben :

$$S_{eff} = S_1 + \alpha \cdot X_{31} \qquad (85)$$

Hierbei beschreibt $S_1$ die Ionisation vom Grundzustand, $X_{31}$ ist der Ratenkoeffizient für die Anregung der n=2 Triplettzustände vom Grundzustand aus und

$$\alpha = S_3 N_e/(A_{13} + X_{3\geq} N_e + S_3 N_e) \qquad (86)$$

ist das Verzweigungsverhältnis für die Ionisation von diesen Niveaus (Ratenkoeffizient $S_3$). $A_{13}$ ist die Übergangswahrscheinlichkeit für den Interkombinationsübergang $2\,^3P_1 - 1\,^1S_0$. Bei den gegebenen Elektronendichten und Temperaturen kann man annehmen, daß die n=2 Triplettzustände untereinander statistisch besetzt sind /147/. Um der Gesamtbesetzung Rechnung zu tragen wird $A_{13}$ daher in der Regel durch 4 geteilt /11/. $X_{3\geq}$ ist der Ratenkoeffizient für den Stoßübertrag von den n=2 Triplettzuständen zu den Singulettniveaus $n \geq 3$.

Für die vorliegenden Plasmabedingungen ist dieser Stoßübertrag bei den Ionen B IV und C V, zusammen mit der Ionisation, der dominierende Verlustmechanismus der Triplettzustände /125/. Demgegenüber ist der Stoßübertrag $X_{32}$ von den Triplettniveaus zu den n=2 Singulettniveaus zu vernachlässigen /126/. Dies gilt auch dann noch, wenn man zur Berechnung von $X_{32}$ neuere Ansätze von Pradhan et al. /127/ zugrunde legt, welche resonante Effekte miteinbeziehen und daher bis zu einem Faktor zwei höhere Werte liefern als nach der Überschlagsformel von Gabriel und

Jordan /125/. Nur bei niedrigen Elektronentemperaturen wird $X_{32}$ mit $X_{3\geq}$ vergleichbar /128/.

Für N VI sind die Strahlungsraten $A_{13}$ und die Stoßraten $(X_{3\geq} + S_3)\cdot N_e$ etwa gleich groß, wohingegen für O VII der Interkombinationsübergang dominiert.

Einschränkend muß man jedoch sagen, daß unsere Analyse von der Berechnung des Triplettionisationsratenkoeffizienten $S_3$ abhängt. Am gebräuchlichsten ist zur Zeit die Formel von Gabriel und Jordan /129/:

$$S_3 = 0{,}61\cdot 10^{-5}\cdot E_3^{-1{,}5}\cdot (kT_e/E_3)^{0{,}5}(2{,}54+kT_e/E_3)^{-1}\exp(-E_3/kT_e) \quad (87)$$

mit der Ionisationsenergie $E_3$ der Triplettniveaus in eV.

Andere Ansätze liefern in etwa gleich große /11/, bzw. um einen Faktor drei kleinere /124/ Raten (vgl. Tab. 15).

Hierdurch wird insbesondere für die Ionen B IV und C V die Berechnung von $\alpha$ auf einen Faktor zwei unsicher.

Eine weitere, gleich große Ungenauigkeit besteht bei der Berechnung des Stoßanregungskoeffizienten $X_{31}$. Mit experimentellen Ergebnissen konsistent ist eine Berechnung aus der Rate für die n=2 Singulettanregung vom Grundzustand $X_{21}$ /124,130/:

$$X_{31} = X_{21} / 1{,}8 \qquad (88).$$

"Close-coupling" Rechnungen von Wyngaarden et al. /131/ ergeben jedoch bis zu einem Faktor zwei kleinere Werte (vgl. Tab 15). Dazwischen liegen die Ergebnisse von Pradhan et al. /127/, die wiederum resonante Effekte mitberücksichtigen.

Schließlich muß man noch dem Anteil an der Besetzungsdichte der n=2 Triplettzustände Rechnung tragen, der durch Kaskaden-

| Ion | $A_{12}$ ($10^8 s^{-1}$) | | | $\Delta E_{12}$ (eV) | $S_2$ ($10^{-10} cm^3 s^{-1}$) | | $X_{23}$ | $X_{2\geq 3}$ | $N_e$ ($10^{12} cm^{-3}$) | $\alpha_{min}$ | $\alpha_{max}$ | $X_{21}$ ($10^{-10} cm^3 s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | a | b | c | | d | e f | | h | | | | i | k |
| B IV | 0,38 | 0,42 | 0,48 | 140 | 30,3 | 30,2 9,2 | 13,6 | 1,1 | 1,3 | 0,39 | 0,48 | 1,61 | ,56 |
| | | | | 175 | 33,2 | 32,5 8,9 | 12,6 | 1,2 | 1,4 | 0,41 | 0,71 | 1,21 | 0,65 |
| C V | 2,5 | 2,8 | 2,1 | 160 | 14,1 | 14,1 4,8 | 7,5 | 1,1 | 1,5 | 0,29 | 0,34 | 0,43 | 0,40 |
| | | | | 210 | 15,3 | 15,2 4,8 | 7,1 | 0,8 | 2,2 | 0,32 | 0,50 | 0,54 | 0,50 |
| N VI | 13 | 14 | 15 | 235 | 7,7 | 7,8 2,8 | 4,3 | 0,6 | 2,6 | 0,14 | 0,31 | 0,29 | 0,23 |
| O VII | 71 | 77 | 90 | 290 | 3,8 | 3,9 1,7 | 2,3 | 0,5 | 3,2 | 0,04 | 0,22 | 0,12 | 0,10 |

Tab. 1 : Strahlungsübergangswahrscheinlichkeiten und Ratenkoeffizienten heliumähnlicher Ionen.

$A_{12}$: Strahlungsübergangswahrscheinlichkeit der Interkombinationslinie $1\,^1S_0 - 2\,^3P_1$ nach Elton 1966 (a)/143/, Drake und Dalgarno 1969 (b)/144/, Laughlin 1975 (c)/145/.

$S_2$ : Ionisationsraten der Triplettzustände n=2 nach Ref./117/ Gl.2 [illegible], Ref./125/ Gl.4-6-3 (e), Ref./124/ Gl. 14 (f).

$X_{23}$: Ratenkoeff. für Stoßübertrag von den n=2 Triplettniveaus zu den Singulettzuständen mit $n \geq 3$ gemäß Ref./125/ Gl. 4-6-4 (g)

$X_{2\geq}$: Ratenkoeff. für Stoßübertrag von den n=2 Triplettniveaus zu den n=2 Singulettzuständen nach Ref./125/ Gl. 4-6-2 (h)

$X_{21}$: Ratenkoeff. für Stoßanregung der n=2 Triplettniveaus vom Grundzustand aus nach der eff. Gaunt-Faktor Näherung $X_{21}/1,8$ /123,124/ (i) und gemäß Ref./131/ (k).

abregung von höher angeregten Niveaus stammt. Üblich ist hier eine Erhöhung von $X_{31}$ um 30 % als untere Grenze /132, 125/.

Insgesamt kann man also den Beitrag der n=2 Triplettzustände zur effektiven Ionisationsrate nur in gewissen Grenzen abschätzen (vgl. Tab. 16). Dadurch wird auch die Bestimmung von $S_1$ zusätzlich zu den statistischen Fehlern mit einer weiteren Ungenauigkeit behaftet. Beim Vergleich mit theoretischen Rechnungen und experimentellen Ergebnissen aus "crossed-beam" Experimenten /133/ kann man deshalb nur die Aussage machen, daß im Rahmen dieser Genauigkeit die Übereinstimmung gut ist (Tab. 16). Nur die theoretischen Werte von Presnyakov /134/ liegen deutlich höher, nämlich 1,4 mal so hoch wie die Lotz'schen Werte.

In Abb. 35 sind noch einmal alle bisher gemessenen Ionisationsraten heliumähnlicher Ionen im Vergleich mit den gängigen Theorien zusammengefaßt.

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_z$ | $N_e$ ($10^{16}cm^{-3}$) | $S_{eff}$ exp | $x_{31}$ min | $x_{31}$ max | $S_{1ex}$ max | $S_{1ex}$ min | $S_{1th}$ Lotz | $S_{1th}$ ECIP | $S_{1th}$ GS | $S_{1th}$ Y |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| B IV | 140 | ,, 4 | 1,3 | 1,64 | 0,2[illegible] | 2, 9 | 1,42 | 0,9[illegible] | 1,18 | 1,17 | 1,00 | 0,98 |
| C IV | 1[illegible] | ,[illegible] | 1,4 | 2,02 | 0,2 | 0,[illegible] | [illegible] | 1,[illegible] | [illegible],80 | 1,82 | 1,55 | 1,[illegible] |
| C V | 1[illegible] | ,[illegible] | 1,6 | 0,48 | 0,[illegible] | 0,[illegible] | 0,32 | 0,21 | 0,30 | 0,32 | 0,28 | 0,28 |
| N V | 10 | ,[illegible]4 | 2,0 | 0,75 | 0,16 | 0,35 | 0,59 | 0,40 | 0,62 | 0,63 | 0,54 | 0,53 |
| N VI | ,[illegible]5 | ,43 | 2,6 | 0,2[illegible] | 0,03 | 0,09 | 0,21 | 0,15 | 0,21 | 0,21 | 0,19 | [illegible],18 |
| O VII | [illegible]3[illegible] | 0,31 | 3,2 | 0,08[illegible] | 0,004 | 0,01 | 0,083 | 0,077 | 0,054 | 0,053 | 0,048 | 0,045 |

Tab. 16 : Ionisationsraten heliumähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3 \cdot s^{-1}$ ).

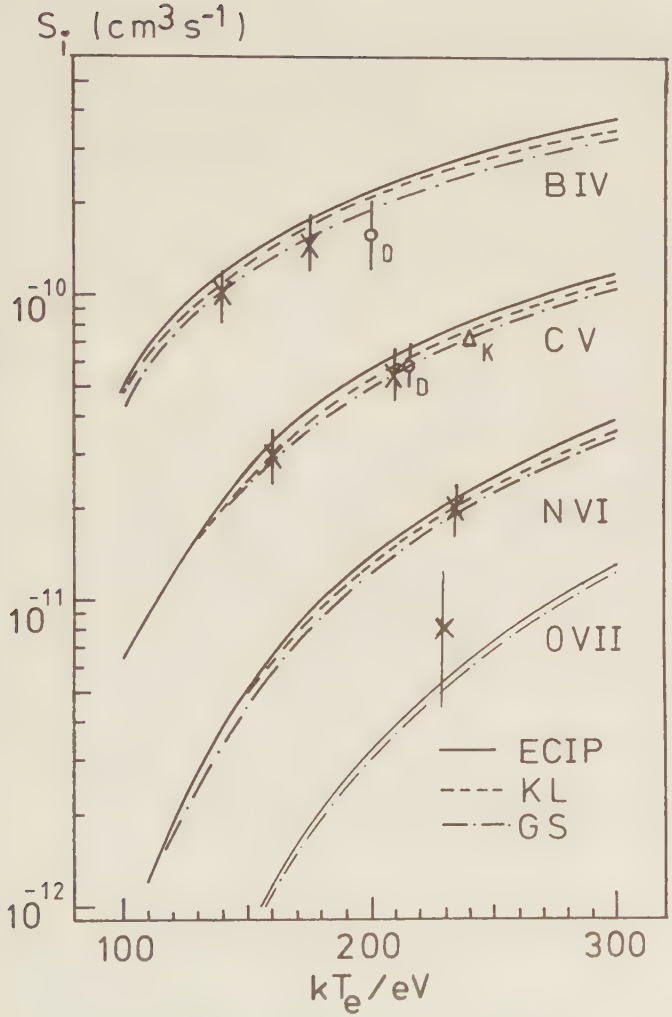



Abb. 35 ( Meßwerte D aus Ref. /123/, K aus Ref./124/)

## 5.3 Lithiumähnliche Ionen

Ionen der lithiumähnlichen isoelektronischen Sequenz zählen zu den am häufigsten untersuchten überhaupt. Auf Grund ihrer relativ niedrigen Ionisationsenergien waren sie schon früh Gegenstand sowohl plasmaspektroskopischer als auch "crossed-beam" Experimente. Allerdings kamen "crossed-beam" Experimente bisher über die effektive Ladungszahl 5 ( O VI) /135/ und plasmaspektroskopische Messungen über die effektive Ladung 7 ( Ne VIII) /136,137/ nicht hinaus.

Zum Vergleich mit theoretischen Rechnungen ist es jedoch wünschenswert, daß Z/N möglichst groß wird, da dann die lithiumähnlichen Ionen immer wasserstoffähnlicher werden. Wir legen nun mit diesen Messungen zum ersten Mal Ionisationsraten für lithiumähnliche Ionen mit den effektiven Kernladungen 10 und 11 vor ( Al XI und Si XII). Gleichzeitig haben wir die Messungen anderer Autoren für die Ionen N V, O VI und Ne VIII wiederholt, sowie der Vollständigkeit halber um F VII erweitert, wofür bisher noch keine exp. Werte vorlagen.

Die Ergebnisse sind in Tab. 17 zusammengefaßt.

Bei der Auswertung muß man berücksichtigen, daß das niedrig gelegene 2p Niveau eine hohe Besetzungsdichte aufweisen kann. Diese läßt sich nach dem Korona-Modell abschätzen.

$$N_{2p}/N_{2s} = X_{12}\, N_e / \left[A_{21} + X_{12} N_e\, (g_{2s}/g_{2p})\, \exp(\Delta E_{12}/kT_e)\right] \qquad (89)$$

Hierbei sind $g_{2s}$ und $g_{2p}$ die statistischen Gewichte, $\Delta E_{12}$ die Energiedifferenz zwischen den Niveaus, $A_{21}$ die Strahlungsübergangswahrscheinlichkeit von 2p nach 2s und $X_{12}$ die Stoßrate von 2s nach 2p, berechnet nach der effektiven Gaunt-Faktor Näherung (Gl.6), gemäß Ref. /121/ der Gaunt-Faktor für $\Delta n=0$ Übergänge mit 2 zu multiplizieren ist.

Wenn die Strahlungsübergänge von 2p nach 2s gegenüber der Abregung durch Stöße zu vernachlässigen sind, d.h. $A_{21}$ im Nenner zu vernachlässigen ist, ergibt Gl. 89 die statistische Gleichverteilung :

$$(N_{2p}/N_{2s})_B = (g_{2p}/g_{2s}) \exp(-\Delta E_{12}/kT_e) \qquad (90).$$

Bei den vorliegenden Plasmabedingungen trifft dies jedoch in keinem Fall zu. Die relativen Besetzungsdichten $N_{2p}/N_{2s}$ betragen für die vorliegenden Ionen von 14 % bei Si XII bis hin zu 60 % bei N V (vgl. Tab. 17). Andererseits sind die Ionisationsenergien der 2p Zustände für die betrachteten Ionen nur um 5 - 10 % niedriger als die Ionisationsenergien der Grundzustände. Damit werden auch die Ionisationsraten für die 2p Niveaus mit denen der Grundzustände vergleichbar /11/. Die effektive Ionisationsrate

$$S_{eff} = S_1 (1 - N_{2p}/N_g) + S_{2p} (N_{2p}/N_g) \qquad (91)$$

$$N_g = N_{2s} + N_{2p}$$

liegt somit um maximal 12 % über der Ionisationsrate des Grundzustandes $S_1$ (vgl. Tab. 17).

Der Diskussion von Rowan und Roberts /138/ folgend kann man auch für unsere Plasmabedingungen Beiträge von angeregten Zuständen $n \geq 3$ vernachlässigen.

Vergleicht man die experimentellen Ionisationsraten für das Grundniveau $S_1$ mit theoretischen Werten, so stellt man fest, daß für die Ladungszustände Z - N von 4 bis 7 die experimentellen Ergebnisse stets 30 - 40 % unterhalb der quantenmechanischen Rechnungen von Golden und Sampson bzw. Younger liegen. Bildet man z. B. das Verhältnis $S_{1ex}/S_{1GS}$ und mittelt diese Werte für alle Ionen von N V bis Ne VIII so erhält man 0,64 ± 0,03 /122/.

Vergleicht man jedoch mit den semiklassischen Rechnungen von Burgess, so ergibt sich für die gleichen Ionen $\langle S_{1ex}/S_{1ECIP}\rangle$ = 1,00 ± 0,05 /122/. Über diese Diskrepanz, die erstmalig bei lithiumähnlichen Ionen auftritt und dann auch bei anderen isoelektronischen Sequenzen mit mehr als drei Restelektronen zu beobachten ist, wurde in der Literatur schon viel diskutiert /11,122,137 - 141/. Wir wollen hier nicht alle Einzelheiten dieser Diskussionen wiederholen, sondern statt dessen auf Grund der vorliegenden Ergebnisse andere Aspekte darstellen, die uns interessant erscheinen.

Trägt man z. B. das Verhältnis $S_{1ex}/S_{1GS}$ als Funktion der effektiven Kernladung Z - N auf, so ergibt sich der in Abb. 36 gezeigte Zusammenhang. Mit steigender Kernladung nähert sich das Verhältnis im Mittel dem Wert eins. Da die Rechnungen von Golden und Sampson im wesentlichen auf wasserstoffähnlichen Ionen basierten, kann die fallende Tendenz von $S_{1ex}/S_{1GS}$ mit fallenden (Z -N) - Werten deshalb zum Teil auch dadurch erklärt werden, daß die entsprechenden Ionen nicht mehr wasserstoffähnlich genug sind. Golden und Sampson selbst geben als Grenze $Z/N \geq 2$ an, bei einer Genauigkeit von 20 - 30 % /87-91/ (vgl. Abschn. 4.3). Für N V und O VI liegt Z/N jedoch **gerade bei 2,3 bzw. 2,7 .**

In die gleiche Richtung weist auch die Subtraktion des Wertes $S_{1ex}$ von $S_{eff}$, die die Autoren für alle nicht wasserstoff- oder heliumähnlichen Ionen durchführen. Diese Korrektur, für die keine physikalische Begründung gegeben wird,

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $N_e$ ($10^{16}cm^{-3}$) | $N_{2p}/N_{2s}$ | $S_{eff}$ exp | $S_{1eff}/S_1$ | $S_1$ exp. | Lotz | ECIP | GS | Y |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| N V | 110 | 1,12 | 0,8 | 0,60 | 4,40 | 1,1 | 3,93 | 7,77 | [illegible] | [illegible] | ,21 |
| N V | 120 | 1,23 | 1,1 | 0,75 | 4,00 | 1,13 | 3,54 | 8,50 | 4,39 | [illegible] | 6,77 |
| O VI | 135 | 0,[illegible] | 1,2 | [illegible] | 2,24 | 1,09 | 2,06 | [illegible] | 2,01 | [illegible] | [illegible] |
| O VI | 160 | 1,16 | 1,3 | [illegible]50 | 2,70 | 1,09 | 2,48 | 4,80 | [illegible] | [illegible] | 4,80 |
| F VII | 160 | 0,86 | 1,5 | [illegible] | 1,43 | 1,06 | 1,35 | 2,20 | 1,09 | 1,78 | 1,83 |
| F VII | 180 | 0,97 | 1,5 | [illegible] | 1,43 | 1,06 | 1,35 | 2,56 | 1,29 | [illegible] | 2,12 |
| Ne VIII | 160 | [illegible] | 1,8 | 0,31 | 0,51 | 1,05 | 0,49 | 1,10 | 0,49 | 0,86 | 0,86 |
| Ne VIII | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | 0,76 | 1,05 | 0,72 | 1,62 | 0,82 | 1,34 | 1,37 |
| Al XI | [illegible] | 0,51 | [illegible] | 0,18 | 0,17 | 1,03 | 0,16 | 0,23 | 0,11 | 0,21 | [illegible] |
| Si XII | [illegible] | 0,42 | [illegible] | [illegible] | 0,10 | 1,01 | 0,10 | 0,11 | 0,05 | 0,10 | 0,10 |

Tab. 17 : Ionisationsraten lithiumähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{10}cm^3s^{-1}$).

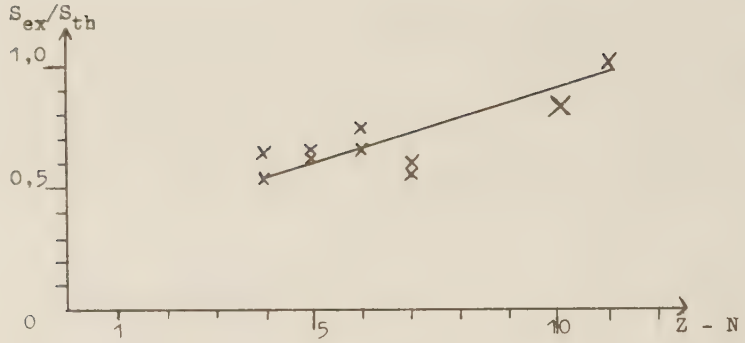



Abb. 36

| Ion | $Z_{effGS}$ | $Z_{effMayer}$ | $\left(\frac{Z_{effGS}}{Z_{effMayer}}\right)^4$ | $\frac{S_{1ex}}{S_{1GSMayer}}$ |
|---|---|---|---|---|
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | 0,82 | [illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |

Tab. 18 : Berechnung des Verhältnisses experimenteller Ionisationsratenkoeffizient zu theoretischem Ratenkoeffizient nach Golden und Sampson mit Hilfe der Abschirmkonstanten von Mayer, jedoch ohne zusätzliche Korrekturen.

wirkt sich für niedrige $Z_{eff}$ stärker aus als für höhere, da die theoretischen Ionisationsraten proportional $1/Z_{eff}$ skalieren. Rechnet man ohne diese Korrektur mit den einen Abschirmkonstanten von Mayer /98/, so ergeben sich die in Tab. 18 aufgeführten Verhältnisse.

Bei dem nun sehr hoch liegenden Wert von Si XII muß man berücksichtigen, daß gerade für dieses Ion die Fehlergrenzen auf Grund der numerischen Anpassung bei 50 % lagen (vgl. Abschn. 3.7).

Wenn man also die Rechnungen von Golden und Sampson mit Hilfe der reinen Abschirmkonstanten von Mayer durchführt, so liegen die theoretischen Werte für N V um 24 % niedriger, für Si XII jedoch nur noch um 12 % niedriger. Mittelt man nun die Werte aus der letzten Spalte von Tab. 18 so erhält man $\langle S_{1ex}/S_{1th} \rangle = 0{,}84 \pm 0{,}15$ .

Einen weiteren Hinweis erhält man bei der Betrachtung der Temperaturabhängigkeit der Ionisationsraten lithiumähnlicher Ionen (Abb. 37, 38, 39). Während das Verhältnis der Lotz'schen Werte zu den ECIP- Werte fast konstant bei zwei bleibt, scheinen sich die Rechnungen von Golden und Sampson bzw. Younger, die stets recht gut übereinstimmen, mit steigender Elektronentemperatur den ECIP Rechnungen zu nähern. Dies ist besonders deutlich bei den Ionen N V, O VI und F VII zu sehen. Bei Ne VIII, Al XI und Si XII zeigt sich dieser Trend auf den Abbildungen weniger ausgeprägt, findet aber für höhere Temperaturen, d.h. in etwa gleiche $kT_e/E_i$ Werte, gleichwohl statt, wie numerische Rechnungen zeigen. Geht man nun davon aus, daß die ECIP-Kurve experimentelle Werte auch für höhere Elektronentemperaturen recht gut wiedergeben würde, auch wenn solche Messungen bis dato noch nicht existieren, so kann man auch hier auf eine Annäherung zwischen experimentellen Ergebnissen und quantenmechanischen Rechnungen hoffen.

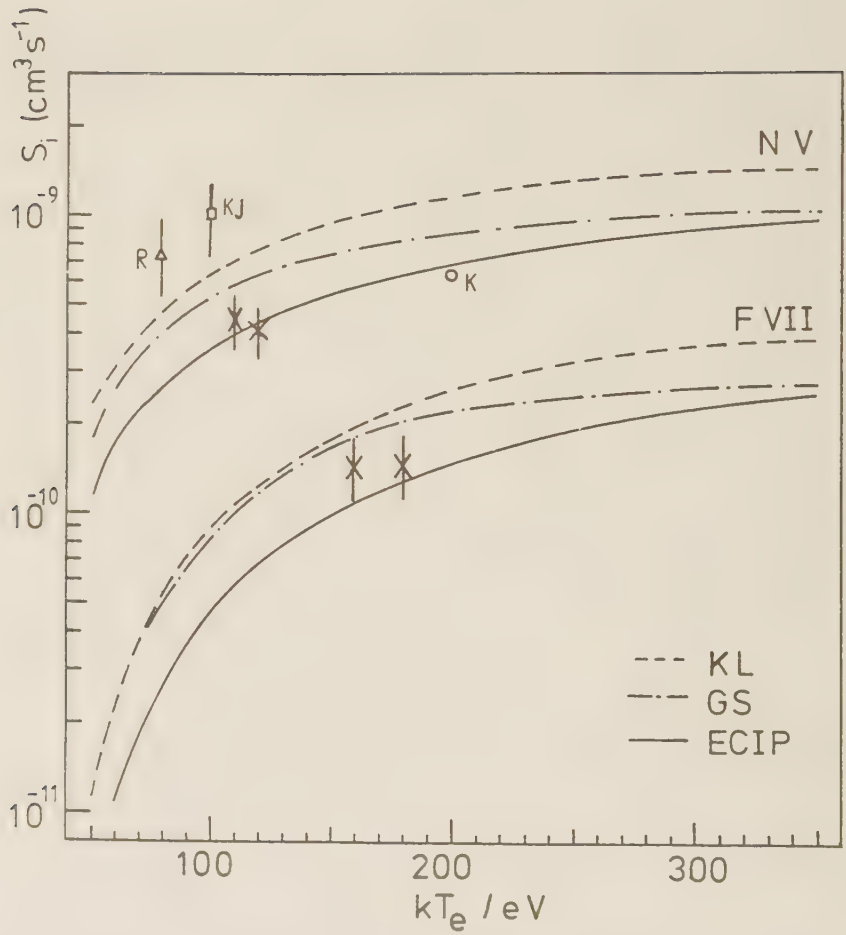



Abb. 37 (Meßwerte K aus Ref./11/,
KJ aus Ref./139/,
R aus Ref./138/).

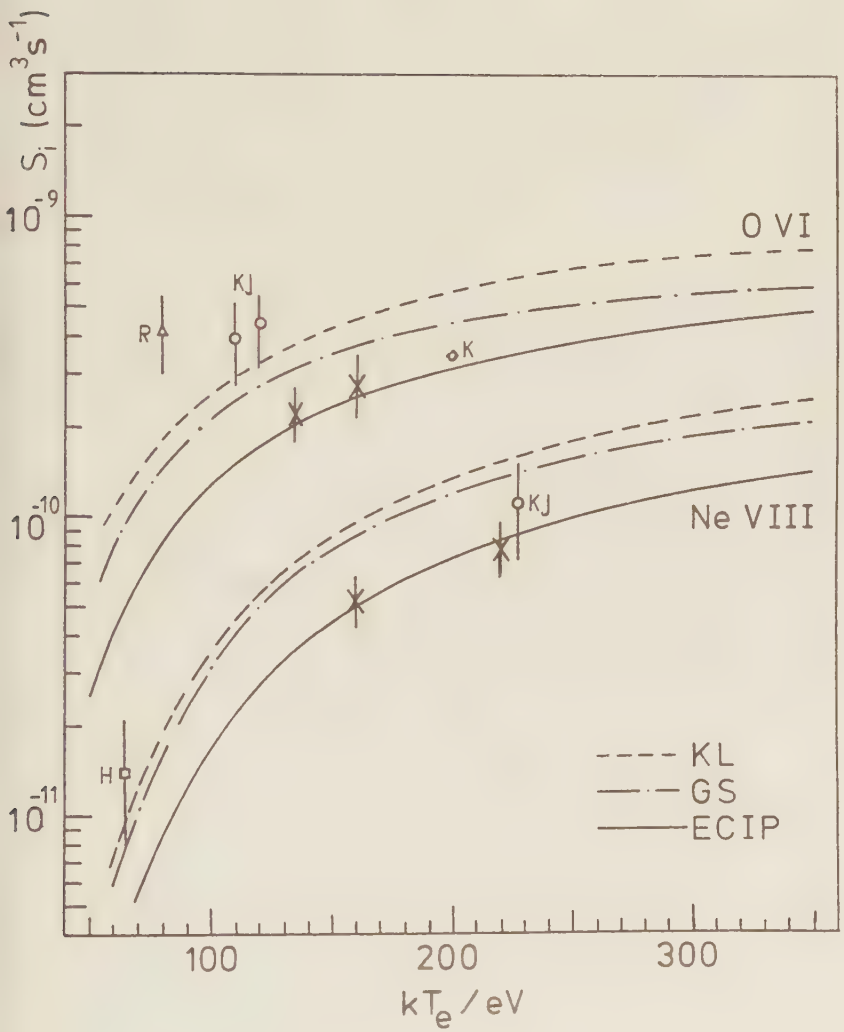



Abb. 38 (Meßwerte K aus Ref./11/,
KJ aus Ref./139/, bzw. /137/ für Ne VIII,
R aus Ref./138/,
H aus Ref./136/ ).

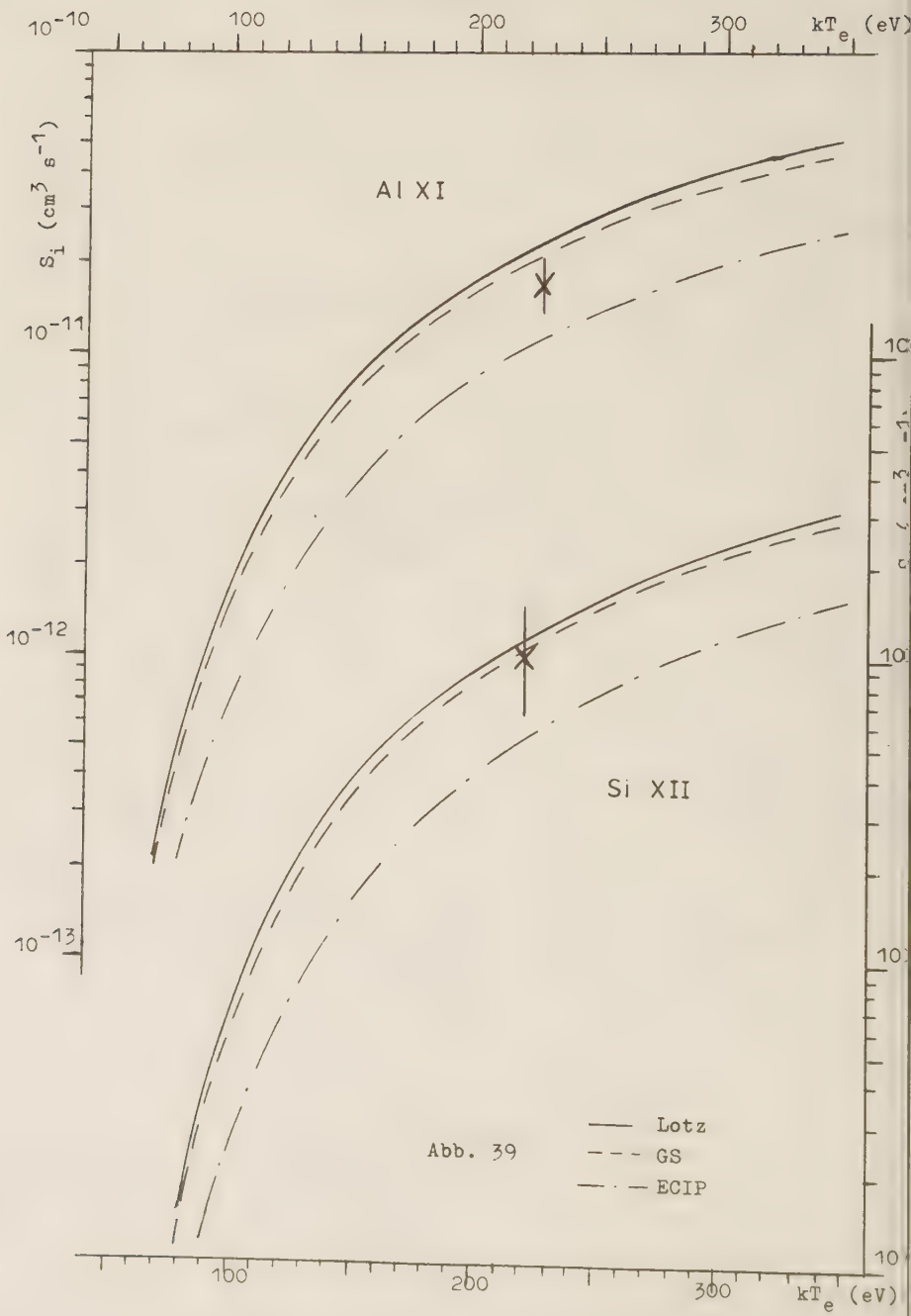

$10^{-10}$
100
200
300
$kT_e$ (eV)
$S_i$ ($cm^3$ $s^{-1}$)
Al XI
$10^{-11}$
$10^{-12}$
$10^{-13}$
Si XII
Lotz
GS
ECIP
100
200
300
$kT_e$ (eV)

Abb. 39

In den Abbildungen 37 und 38 sind auch die experimentellen Ergebnisse anderer Gruppen für lithiumähnliche Ionen eingezeichnet. Zum Teil bestätigen sie die oben gemachten Betrachtungen, zum Teil liegen sie deutlich über sämtlichen theoretischen Rechnungen. Gerade zu diesen recht hohen Werten gilt es noch einige Bemerkungen zu machen.
Die Messungen von Källne und Jones (K.J.) für N V und O VI wurden nicht mit Wasserstof als Füllgas gemacht, sondern in Stickstoff bzw. Helium durchgeführt. Solche Gase können durch Ionisation beträchtlich zu einer Erhöhung der Elektronendichte beitragen, ohne daß eine Kompression stattfindet. Deshalb bedarf es unserer Meinung nach für Messungen mit anderen Füllgasen als Wasserstoff einer Modifikation des Quellterms innerhalb der Ratengleichungen. Wir kommen auf dieses Problem noch in einem gesonderten Abschnitt zurück. Inwieweit eine solche Modifikation bei den oben genannten Messungen berücksichtigt wurde, ist aus Ref. 139 nicht ersichtlich. Ferner schreiben die Autoren, daß bei ihren numerischen Anpassungen die Linienverläufe unempfindlich waren bezüglich Änderungen der effektiven Ionisationsraten. Nur die Zeit der maximalen Emission konnte angepaßt werden. Unserer Meinung nach ist jedoch gerade der zeitliche Anstieg und Abfall der Linienintensitäten bei der Bestimmung der effektiven Ionisationsraten wesentlich (vgl. Abschn. 3.6), wohingegen der Zeitpunkt der maximalen Emission stark durch den relativen Elektronendichte und Temperaturverlauf beeinflußt wird.

Auch bei den Messungen von Rowan und Roberts /142/ (R.R.) werden systematische Fehler nicht ausgeschlossen /142/. Hier laufen deshalb momentan an der gleichen Anlage erneute Messungen für N V, O VI und Ne VIII. Ergebnisse liegen jedoch zur Zeit noch nicht vor.

## 5.4 Berylliumähnliche bis neonähnliche Ionen

Für die isoelektronischen Sequenzen von Beryllium bis Neon ist ein Vergleich der gemessenen effektiven Ratenkoeffizienten mit theoretischen Rechnungen nicht sehr aussagekräftig, denn eine einigermaßen sichere Berechnung der Ionisationsrate des Grundzustandes aus der effektiven Ionisationsrate ist nur schwer möglich. Zum einen werden die atomaren Systeme immer komplexer, zum anderen fehlen die Anregungsraten und Übergangswahrscheinlichkeiten für eine einigermaßen richtige Berücksichtigung der verschiedenen möglichen Ionisationszweige.

Nehmen wir z.B. berylliumähnliche Ionen. Neben mehreren niedrig gelegenen Zuständen ( $1s^2 2s2p\ ^1P$, $2p^2\ ^1S$, $2p^2\ ^1D$ und $2p^2\ ^3P$), deren Besetzungsdichten es mittels des Koronamodells abzuschätzen gilt, gibt es noch das ebenfalls energetisch niedrig gelegene metastabile Niveau $1s^2 2s2p\ ^3P$. Die Bevölkerung dieses Niveaus aber geschieht nicht nur durch Stoß- und Strahlungsprozeße innerhalb des berylliumähnlichen Ions, sondern auch durch Innerschalenionisation borähnlicher Ionen $1s^2 2s^2 2p\ ^2P \rightarrow 1s^2 2s2p\ ^3P + e^-$ .

Dieser Prozeß kann sogar gegenüber der direkten Stoßanregung vom Grundzustand aus dominieren, ist doch der Wirkungsquerschnitt für die Ionisation aus der 2s - Schale borähnlicher Ionen mit demjenigen des 2p Elektrons vergleichbar /148/.

Zu den Schwierigkeiten bei der Berechnung einzelner Besetzungsdichten kommt die Unkenntnis der Wirkungsquerschnitte bzw. Ratenkoeffizienten für die Ionisation von diesen Zuständen aus. Wir haben deshalb für die angegebenen isoelektronischen Sequenzen auf die Zurückrechnung der gemessenen effektiven Ionisationsraten in solche des Grundzustandes verzichtet.

Gleichwohl sind aber die theoretischen Ionisationsraten der Grundzustände in den Tabellen 19 bis 25 zum Vergleich mit aufgeführt.

Die experimentell gemessenen effektiven Ratenkoeffizienten beziehen sich somit stets auf den entsprechenden Ladungszustand insgesamt und stellen ein Maß dar, welche Lebensdauer der entsprechende Ionisationszustand in einem heißen Plasma hat.

$$\tau \simeq 1/ ( S_{eff} \cdot N_e ) \qquad (92)$$

Sie sind daher grundsätzlich die geeigneten Raten bei der Modellierung von Laborplasmen oder astrophysikalischer Plasmen, wenngleich verschiedene Plasmaparameter auch eine unterschiedliche Wichtung der einzelnen Prozeße bewirken können, welche zur effektiven Ionisationsrate beitragen.

Die Ionisationsrate des Grundzustandes, oder auch die Summe einzelner Raten verschiedener Zustände hingegen beschreibt atomphysikalische Prozeße, die in dieser Reinheit in Plasmen selten vorkommen. Diese Raten oder Wirkungsquerschnitte eignen sich deshalb besser zum Vergleich mit "crossed-beam" Daten, obschon auch diese Experimente von Komplikationen durch metastabile Zustände nicht frei sind /149/. Das metastabile $2\,^3P$ Niveau von berylliumähnlichen N IV oder O V Ionen hat z.B. Lebensdauern im Millisekundenbereich /150/. Dadurch gelangt ein nicht genau abschätzbarer Anteil von bis zu 50 % angeregter Ionen in den Reaktionsraum dieser Experimente /133/.

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS | Y |
| C V | 120 | 1,0[illegible] | 1,0 | 6,5 | 12,0 | 6,2 | [illegible]3,9 | 9,5 |
| F VI | 140 | 0,89 | 1,2 | 2,7 | 5,8 | 3,1 | 4,7 | 4,9 |
| F VI | 150 | 0,9[illegible] | 1,3 | 4,8 | 6,3 | 3,4 | 5,1 | 5,3 |
| Ne VII | 150 | 0,72 | 1,4 | 1,6 | 2,8 | 1,5 | 2,4 | 2,4 |
| Ne VII | 170 | 0,82 | 1,5 | 1,9 | [illegible]3,4 | 1,8 | 2,9 | 2,9 |
| Al X | 235 | 0,59 | 2,7 | 0,58 | 0,74 | 0,37 | 0,65 | 0,65 |
| Si XI | 230 | 0,48 | 3,1 | 0,24 | 0,3[illegible] | 0,18 | 0,34 | 0,34 |

Tab. 19 : Ionisationsraten berylliumähnlicher Ionen
( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$).

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS |
| F V | 120 | 1,05 | 1,0 | 5,4 | 15 | 8,0 | 12 |
| Ne VI | 140 | 0,89 | 1,2 | 3,5 | 7,4 | 3,9 | 6,3 |
| Ne VI | 140 | 0,89 | 1,2 | 3,8 | 7,4 | 3,9 | 6,3 |
| Al IX | 220 | 0,67 | 2,1 | 0,63 | 1,6 | 0,84 | 1,5 |
| Si X | 230 | 0,57 | 2,5 | 0,48 | 0,92 | 0,47 | 0,89 |

Tab. 20 : Ionisationsraten borähnlicher Ionen
( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$ ).

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS |
| Al VIII | 175 | 0,[illegible]1 | 1,5 | 1,7 | 2,4 | 1,3 | 2,2 |
| Si IX | 220 | 0,[illegible]2 | 2,0 | 1,2 | 1,8 | 0,[illegible]0 | 1,8 |

Tab. 21 : Ionisationsraten kohlenstoffähnlicher Ionen
( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$ ).

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS |
| Al VII | 160 | [illegible] | 1,3 | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| Si VIII | 160 | 0,29 | 1,6 | [illegible] | 2,6 | 1,4 | 2,6 |

Tab. 22 : Ionisationsraten stickstoffähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$ ).

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS |
| Ar XI | [illegible] | 0,43 | 3,1 | 0,25 | 0,60 | 0,31 | 0,63 |

Tab. 23 : Ionisationsraten sauerstoffähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$ ).

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS |
| Ar X | 160 | 0,33 | 1,6 | 0,18 | 0,40 | 0,20 | 0,43 |
| Ar X | 230 | 0,48 | 2,5 | 0,58 | 1,1 | 0,60 | 1,2 |

Tab. 24 : Ionisationsraten fluorähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$).

| Ion | $kT_e$ | $kT_e/E_i$ | $N_e$ | $S_{eff}$ | $S_{1th}$ | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | (eV) | | ($10^{16}cm^{-3}$) | exp | Lotz | ECIP | GS | Y* |
| Ar IX | 160 | 0,38 | 1,6 | 0,48 | 0,81 | 0,44 | 0,87 | 0,89 |
| Ar IX | 210 | 0,50 | 1,9 | [illegible] | 1,1 | 0,9 | [illegible] | [illegible] |

Tab. 25 : Ionisationsraten neonähnlicher Ionen in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$ );

* diese Werte wurden aus den in Ref. /102/ angegebenen Wirkungsquerschnitten mittels eines von Lammers /146/ beschriebenen Integrationsprogramms ermittelt.

Ansonsten gilt wieder folgendes:

Die gemessenen effektiven Ionisationsraten werden im Mittel besser durch die ECIP - Rechnungen als durch die Lotz'schen Werte wiedergegeben.

Die theoretischen Ergebnisse von Golden und Sampson liegen im Mittel stets um einen Faktor 1,6 höher als die experimentellen Werte, erniedrigen sich jedoch um bis zu 30 %, wenn die oben schon erwähnte Konstante von 0,4 nicht in Abzug gebracht wird. In den meisten Fällen wird auch die Grenze $Z/N \geq 2$ unterschritten, so daß die Genauigkeit von 30 % nicht mehr gewährleistet ist.

Für hohe Elektronentemperaturen nähern sich die Rechnungen von Golden und Sampson bzw. Younger wieder den ECIP - Werten an.

Zu beachten ist auch, daß bei den Rechnungen von Golden und Sampson die Beiträge der einzelnen Schalen einfach aufsummiert werden, analog den semiempirischen und semiklassischen Rechnungen. Wechselwirkungen der Schalen untereinander können in den skalierten wasserstoffähnlichen Rechnungen nicht berücksichtigt werden.
Gerade die Berücksichtigung der Wechselwirkungsprozeße zwischen den Elektronen bzw. Schalen kann aber zu einer Erniedrigung der quantenmechanisch berechneten Ergebnisse führen. Dies zeigt sich z.B. bei neonähnlichen Ionen, dem einzigen Fall mit mehr als zwei Elektronen in der äußeren Schale, für den "distorted-wave" Rechnungen vorliegen /102/. Der Wirkungsquerschnitt für die Elektronenstoßionisation mit Berücksichtigung semiklassischer Austauschwechselwirkung liegt für Na II Ionen im Bereich $1 \leq E_s/E_i \leq 3$ um 20 - 50 % unterhalb derjenigen, die unter Vernachlässigung der Austauschwechselwirkung berechnet wurden.

Ferner liegen für neonähnliche Ionen auch Ionisationswirkungsquerschnitte von Na II /151,152/ und Mg III /153/ aus "crossed-beam" Experimenten vor. Vergleicht man sie mit den quantenmechanischen Rechnungen für diese Ionen, so fällt $Q_{th}/Q_{ex}$ von Werten bei 1,8 asymptotisch auf 1,4 bzw. 1,3 ab ( vgl. Abb. 40, die Ref. 102 entnommen ist). Die entsprechenden Verhältnisse $Q_{ex}/Q_{th}$ sind 0,56 bzw. 0,77 . Bei den von uns gemessenen Raten liegt das Verhältnis $S_{ex}/S_{thY}$ in der gleichen Gegend, nämlich bei 0,54 bzw. 0,56 .

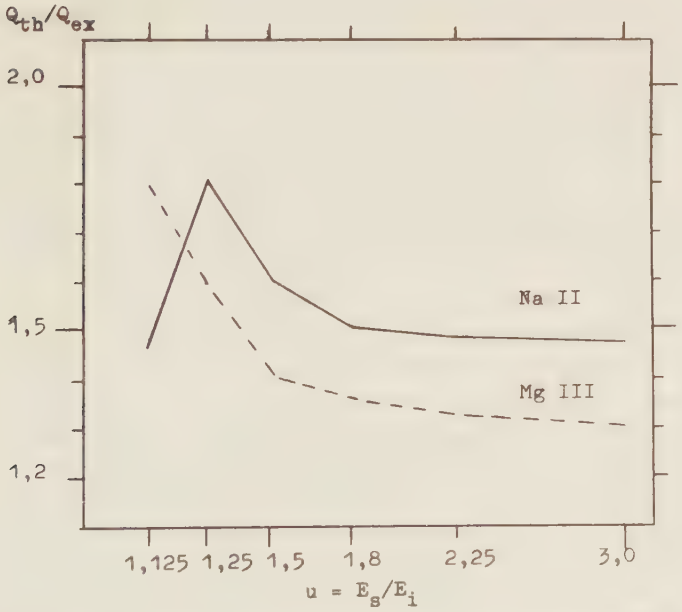



Abb. 40 : Verhältnis theoretischer Wirkungsquerschnitte für die Elektronenstoßionisation neonähnlicher Ionen nach der "distorted-wave" Näherung /102/ zu experimentellen Werten aus Ref./151-153/.

## 5.5 Natriumähnliche Ionen

Natriumähnliche Ionen sind, mit nur einem äußeren Elektron, in ihrer Struktur ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$) ähnlich einfach wie lithiumähnliche Ionen. Analog den dortigen Rechnungen lassen sich die Beiträge der 3p und 3d Zustände zur effektiven Ionisationsrate bestimmen. Die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten und Anregungsraten sind den Arbeiten von Edlén /154/, Blaha und Davies /155/ bzw. Datla et al. /156/ entnommen.

Bei maximalen relativen Besetzungsdichten $N_{3p}/N_{3s}$ bzw. $N_{3d}/N_{3s}$ von 20 % in allen drei gemessenen Fällen, beträgt das Verhältnis $S_{eff}/S_1$ höchstens 1,05, denn die Ionisationsraten $S_{3p}$ und $S_{3d}$ sind mit derjenigen des Grundzustandes $S_{3s}$ vergleichbar.

Mit zunehmenden Elektronentemperaturen wird jedoch der Anteil der direkten Innerschalenionisation aus den abgeschlossenen 2s und 2p Schalen heraus immer größer. Abb. 41 zeigt das Verhältnis $S_{2p}/S_{3s}$ für Ar VIII und Ti XII als Funktion der Elektronentemperatur und läßt erkennen, daß in unseren drei Fällen dieser Anteil bei ca. 10 - 15 % liegt. Für Elektronentemperaturen oberhalb 1 keV oder für natriumähnliche Ionen mit höherem Z kann die Innerschalenionisation jedoch der dominierende Mechanismus sein.

Die zunehmende Bedeutung dieses Prozeßes ergibt sich auch aus der Tatsache, daß der skalierte reduzierte Wirkungsquerschnitt für die Elektronenstoßionisation eines 2p Elektrons $u \cdot E_i^2 \cdot Q_r(2p)$ für Werte nahe dem Schwellwert (z.B. $u = E_s / E_{2p} = 1,05$) entlang der isoelektronischen Sequenz von Mg II bis Ar VIII um einen Faktor 4 größer wird, während derjenige für das 3s Elektron $u \cdot E_i^2 \cdot Q_r(3s)$ unter gleichen Bedingungen nahezu konstant bleibt /159/.

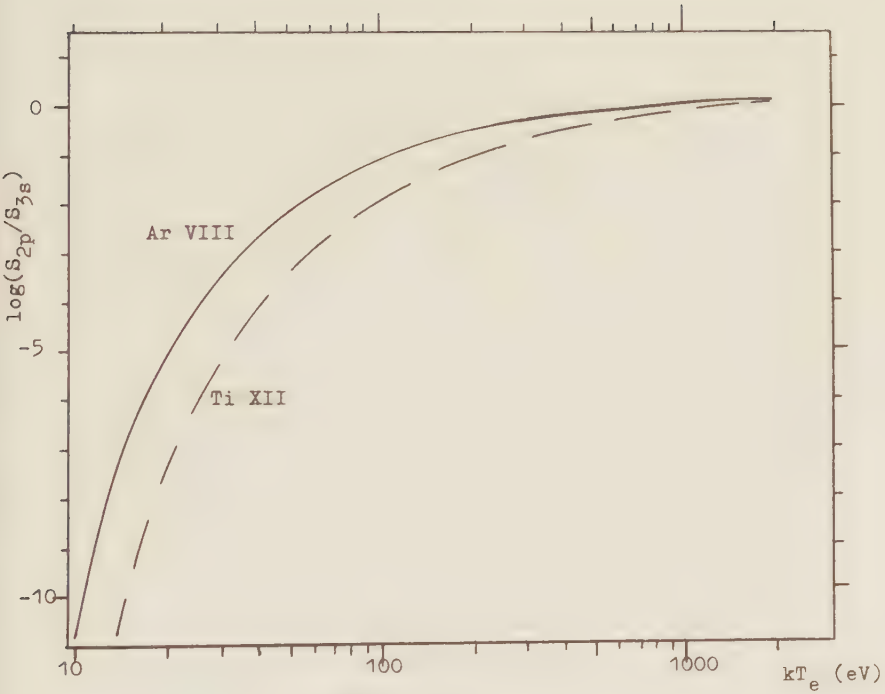



Abb. 41

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $N_e$ ($10^{16}cm^{-3}$) | $S_{eff}$ exp | $S_{1th}$ Lotz | ECIP | GS | Y |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Ar VIII | 130 | 0,91 | 1,1 | 2,6 | 4,0 | 1,2 | 3,0 | 3,2 |
| Ar VIII | 160 | 1,11 | 1,3 | 2,7 | 3,4 | 1,1 | 4,2 | 4,4 |
| Ti XII | 930 | 0,79 | 2,4 | 0,62 | 1,1 | 0,50 | 1,0 | 0,93 |

Tab. 26 : Ionisationsraten natriumähnlicher Ionen
( in Einheiten von $10^{-10}$ $cm^3$ $s^{-1}$ ).

Tabelle 3c zeigt die Ergebnisse unserer Messungen für natriumähnliche Ionen im Vergleich zu theoretischen Werten. Diese berechnen sich aus der Summation über alle Schalen, jedoch ohne Anregungs-Autoionisationsbeitrag. Das Verhältnis der experimentellen zu den Lotz'schen Werten liegt im Mittel bei 0,63 ± 0,12. Dies entspricht dem schon von Datla et al. /156/ angegebenen Verhältnis für Ar VIII .

Im Vergleich zu den ECIP - Werten liegt das Mittel $S_{ex}/S_{ECIP}$ bei 1,37 ± 0,3 und somit um 30 % höher als bei den lithiumähnlichen Ionen. Andererseits liefern die quantenmechanischen Rechnungen von Golden un Sampson bzw. Younger im Verhältnis zu den Lotz'schen Werten niedrigere Ergebnisse, so daß das Verhältnis $S_{ex}/S_{GS}$ bzw. $S_{ex}/S_{Y}$ bei 0,77 ± 0,13 bzw. 0,75 ± 0,12 liegt.

Aus "crossed-beam" Experimenten liegen Vergleichswerte für folgende natriumähnlichen Ionen vor : Mg II /157/, Al III und Si IV /158/. Während die Wirkungsquerschnitte von Mg II nur ca. 10 % unterhalb der von Younger /159/ berechneten Werte liegen, berichten Crandall et al. /158/ von Messungen an Al III und Si IV bei denen die experimentellen Ionisationswirkungsquerschnitte halb so groß waren wie die theoretisch von Golden und Sampson berechneten, [illegible].

## 5.6 Weitere isoelektronische Sequenzen

Bei der Interpretation der Ergebnisse für magnesiumähnliche, aluminiumähnliche und siliziumähnliche Ionen , deren Ionisationsraten in den Tabellen 27 bis 29 dargestellt sind, gilt im Prinzip das in Abschn. 3.4 gesagte, mit der zusätzlichen Schwierigkeit, die Innerschalenprozeße mit sich bringen.

Dementsprechend sind die Ergebnisse nicht sehr einheitlich. Beim Vergleich ist wiederum zu beachten, daß die experimentellen Daten als effektive Raten zu betrachten sind, während die theoretischen Werte sich nur auf den jeweiligen Grundzustand beziehen. Übereinstimmung experimenteller Werte mit dem einen oder anderen theoretischen Wert deuten deshalb lediglich darauf hin, daß die Größenordnung stimmt.

**Frühere plasmaspektroskopische Messungen an einem anderen** Versuchsaufbau mit völlig verschiedenem Injektionsverfahren ergaben für Eisenionen der isoelektronichen Sequenzen von Phosphor (Fe XII ) bis Kalium ( Fe VIII ) ein ähnliches Bild /160,161/. Das Verhältnis der experimentell gemessenen effektiven Ionisationsraten zu den semiempirischen Werten von Lotz bewegte sich für Elektronentemperaturen von 110 - 200 eV zwischen 0,48 (Fe VIII) und 1,0 (Fe XII).

Analog ist die Situation auch beim Vergleich mit experimentellen Wirkungsquerschnitten aus "crossed-beam" Experimenten, die in jüngster Zeit an Argonionen gemessen wurden /162/. Die Autoren geben an, daß sich ihre Ergebnisse für alle Ladungszustände von Ar II bis Ar VI (entsprechend der isoelektronischen Sequenzen von Aluminium bis Chlor ) einheitlich durch folgenden Ausdruck wieder-

geben lassen:

$$q_{MS} = [illegible] \cdot 10^{-13} \ln(E_s/E_i) / (E_s \cdot E_i) \quad (eV^2\, cm^2) \,. \qquad (93)$$

Diese Formel gleicht in ihrer Struktur derjenigen von Lotz (vgl. Gl. 50), jedoch ist der Vorfaktor hier unabhängig von der Anzahl der Elektronen in der entsprechenden Schale.

Vergleicht man die experimentellen mit den semiempirischen Werten, so muß man letztere über alle Unterschalen aufsummieren. Für eine Elektronenenergie $E_s$ von 300 eV ergeben sich dann Verhältniswerte $q_{ex}/q_{Lotz}$ von [illegible] , [illegible] , [illegible] , [illegible] und [illegible] für die Ladungszustände Ar II bis Ar VI.

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $N_e$ ($10^{[illegible]}$ cm$^{-3}$) | $S_{eff}$ exp | $S_{th}$ Lotz | $S_{th}$ ECIP | $S_{th}$ GS |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Ar VII | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| Ti XI | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |

Tab. 27 : Ionisationsraten magnesiumähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{[illegible]}$ cm$^3$ s$^{-1}$ ).

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $N_e$ ($10^{[illegible]}$ cm$^{-3}$) | $S_{eff}$ exp | $S_{th}$ Lotz | $S_{th}$ ECIP | $S_{th}$ GS |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Ti X | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | 4.2 | [illegible] | [illegible] |

Tab. 28 : Ionisationsraten aluminiumähnlicher Ionen ( in Einheiten von $10^{[illegible]}$ cm$^3$ s$^{-1}$ ).

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $N_e$ ($10^{[illegible]}$ cm$^{-3}$) | $S_{eff}$ exp | $S_{th}$ Lotz | $S_{th}$ ECIP | $S_{th}$ GS |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Ti IX | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |

Tab. [illegible] : Ionisationsraten [illegible] Ionen ( in Einheiten von [illegible] ).

## 5.7 Messungen mit Krypton

Messungen mit Krypton als Verunreinigungsgas konnten nur bis zum Ladungszustand Kr X durchgeführt werden, da für die höheren Ionisationsstufen bis hin zu Kr XXXVI keine Spektrallinien dokumentiert sind /163/. Zwar erschienen vor kurzer Zeit zwei Arbeiten mit einzelnen Übergängen in Kr XI und Kr XII /164, 165/, jedoch konnten diese Linien in unserer Anlage nicht eindeutig identifiziert werden. In den angegebenen Spektralbereichen lag eine solche Fülle von Linien, daß eine eindeutige Zuordnung einzelner Intensitäten zu bestimmten Ladungszuständen ohne weitere Referenzlinien nicht möglich war.

Numerischen Abschätzungen zufolge sollte es jedoch möglich sein, mit unseren Plasmabedingungen Krypton bis hin zur 3p - Schale , d.h. Kr XIX , zu ionisieren.

Die zwei Ratenkoeffizienten für Kr IX und Kr X sind in Tab. 30 aufgeführt. Theoretische Vergleichswerte wurden nicht mit aufgelistet, da bei diesen Ionen ein großer Beitrag innerer Schalen zu erwarten ist, die entsprechenden Ionisationsenergien aber nur extrapoliert werden können.

| Ion | $kT_e$ (eV) | $kT_e/E_i$ | $n_e$ ($10^{13}$ cm$^{-3}$) | $S_{eff}$ exp |
|---|---|---|---|---|
| Kr IX | 170 | 0,74 | 1,5 | 1,3 |
| Kr X | 190 | 0,72 | 1,7 | 2,2 |

Tab. 30 : Ionisationsraten von Kryptonionen ( in Einheiten von $10^{-10}$ cm$^3$s$^{-1}$ ).

## 5.8 Ergänzende Bemerkungen

In einem der letzten Abschnitte klang schon an, daß neben der direkten und Innerschalenionisation auch der indirekte Prozeß über die Anregung eines gebundenen Zustandes oberhalb der Ionisationsenergie des Grundzustandes und nachfolgender Autoionisation in manchen Fällen zur effektiven Ionisationsrate beitragen kann. Dies gilt insbesondere für isoelektronische Sequenzen, die relativ zur äußeren Schale viele Elektronen in der ersten inneren Schale haben, wie z. B. natriumähnliche, magnesiumähnliche und zum Teil auch noch lithiumähnliche Ionen.

Die Berechnung des Beitrags der Anregungs-Autoionisationsprozeße erfordert die Kenntnis der Anregungsraten für die autoionisierenden Zustände, d.h. für alle gebundenen Zustände des Ions oberhalb der Ionisationsenergie des Grundzustandes, sowie der Verzweigungsverhältnisse für die Autoionisation von diesen Zuständen aus

$$B_j^a = \sum_m A_{jm}^a \; / \; (\sum_m A_{jm}^a + \sum_k A_{jk}^r ) \qquad (94)$$

mit den Übergangswahrscheinlichkeiten für einen autoionisierenden Prozeß $A_{jm}^a$ bzw. für einen Strahlungsübergang $A_{jk}^r$ vom Zustand $j$ aus.

Frühere Abschätzungen /166,167/ des Beitrages der Autoionisation zur effektiven Ionisationsrate rechneten mit dem Verzweigungsverhältnis $B_j^a = 1$ und kamen zu dementsprechend hohen Werten. Neuere Rechnungen gehen jedoch davon aus, daß gerade für hohe Kernladungen Z, bei denen das Verhältnis der Anregungsraten autoionisierender Zustände zu den direkten Ionisationsraten groß wird, auch die Strahlungsübergangswahrscheinlichkeiten $A_{jk}^r$ von den

autoionisierenden Zuständen zurück groß werden. Für Dipolübergänge mit $\Delta n \neq 0$ skalieren sie z.B. mit $Z_{eff}^4$. Da andererseits die Autoionisationswahrscheinlichkeiten $A_{jm}^a$ fast unabhängig von Z sind, reduziert sich das Verzweigungsverhältnis für hohe Z beträchtlich, so daß sich der Beitrag des Anregungs-Autoionisationsprozeßes insgesamt in Grenzen hält /168/.

Welchen absoluten Beitrag dieser Prozeß aber wirklich liefert, läßt sich auch aus neueren theoretischen Arbeiten /169/ nicht ableiten, da die Annahmen bezüglich der Verzweigungsverhältnisse immer noch zu pauschal sind. Andererseits kann man vielleicht mit plasmaphysikalischen Experimenten einen gewissen Beitrag zu diesen Fragen liefern, indem man die Linienintensitäten von Übergängen mißt, die von einem solchen autoionisierenden Niveau ausgehen (z.B. dem $2p^5 3s^2$ Zustand von Ti XII bei ca. 3.600.000 $cm^{-1}$ und einer Ionisationsgrenze bei 2.351.100 $cm^{-1}$ /170/).

In letzter Zeit wird im Zusammenhang mit dem Ionisationsgleichgewicht von Tokamakplasmen bei der Neutralteilcheninjektion noch ein anderer atomphysikalischer Vorgang diskutiert, nämlich der Ladungsaustausch zwischen hochionisierten Atomen $A^z$ und neutralen Wasserstoffatomen H /171/

$$A^z + H \longrightarrow A^{z-1} + H^+ \quad .$$

Dieser Vorgang wirkt für das Ion $A^z$ effektiv als Rekombinationsmechanismus, und es ist daher sinnvoll, seine Bedeutung für die vorliegenden Messungen durch einen Vergleich mit anderen Rekombinationsprozeßen abzuschätzen.

Für das Verhältnis Rekombinationsrate durch Ladungsaustausch $R_q^{cx}$ zur dielektronischen Rekombinationsrate $R_q^d$ des Ions q gilt :

$$R_q^{cx} / R_q^d = N_n \cdot \int v_n \cdot \sigma(v) \cdot f(v)\, dv \; / \; (N_e \cdot \alpha_q^d) \qquad (95)$$

Für große Kernladungen Z (d.h. in der Regel Z > 4 ) wird der Wirkungsquerschnitt für den Ladungsaustausch $\sigma^{cx}$ über weite Bereiche nahezu unabhängig von der Relativgeschwindigkeit $v_n$ /172/. Berücksichtigt man noch, daß das erste Moment der Verteilungsfunktion die mittlere Geschwindigkeit $u_n$ ergibt, so reduziert sich Gl. 95 zu:

$$R_q^{cx} / R_q^d = N_n \cdot u_n \cdot \sigma^{cx} / N_e \cdot \alpha_q^d \quad . \qquad (96)$$

Den relativen Anteil von neutralem Wasserstoff in unserem Plasma schätzen wir aus der Korona-Beziehung ab.

$$N^+/N_n = S_H / \alpha_H \qquad (97)$$

Somit gilt unter Berücksichtigung der Quasineutralität $N^+ = N_e$ :

$$R_q^{cx} / R_q^d = u_n \cdot \sigma^{cx} \cdot \alpha_H / S_H \cdot \alpha_q^d \qquad (98)$$

Betrachten wir als Beispiel den Fall von fünffach ionisiertem Kohlenstoff C VI, da hierfür theoretische und experimentelle Umladungsquerschnitte gut übereinstimmen /173/ ( $\sigma^{cx}(C\ VI) \simeq 3 \cdot 10^{-15}$ cm$^2$). Bei einer mittleren Geschwindigkeit der neutralen Wasserstoffatome von $2 \cdot 10^7$ cm s$^{-1}$ und einer Ionisationsrate des Wasserstoffs von $3 \cdot 10^{-8}$ cm$^3$s$^{-1}$ (entsprechend einer Elektronentemperatur von 200 eV) gilt :

$$u_n \cdot \sigma^{cx} / S_H \simeq 2 \qquad (99)$$

Nimmt man an, daß die dielektronische Rekombination auch für die Wasserstoffionen dominiert und berücksichtigt, daß sie im wesentlichen proportional $Z^2$ ist /174/, so ergibt sich:

$$R^{cx} / R^d \simeq 2 / Z^2 \simeq 1/18 \quad . \qquad (100)$$

Für Ionen mit höhere effektiver Kernladung sollte dieses Verhältnis eher noch günstiger werden, da die Umladungsquerschnitte gemäß verschiedener theoretischer Ansätze für $Z_{eff} \leq 10$ nur proportional Z bzw. $Z^{1,12}$ und $Z^{1,17}$ skalieren (vgl. Tab. 1 in Ref. 173).

Da wir auf der anderen Seite während der numerischen Anpassung für C VI und andere Ionen die in den Ratengleicungen eingearbeiteten Rekombinationskoeffizienten willkürlich um einen Faktor zehn **erhöhen konnten ohne daß eine** wesentliche Beeinflußung der berechneten Linienverläufe stattfand, glauben wir eine Bedeutung der Ladungsaustauschprozeße für unsere Messungen ausschließen zu können.

Experimentell kann man den Einfluß von Umladungsreaktionen hochgeladener Ionen mit neutralem Wasserstoff eliminieren, wenn man die plasmaspektroskopische Methode auf Messungen in reinen Gasen (z.B. Stickstoff oder Neon) anwendet. Neben verstärkten Problemen mit der optischen Tiefe von Resonanzlinien **gilt** es hierbei jedoch zu beachten, daß die dann gültige Quasineutralitätsbedingung

$$N_e = \sum_{k=1}^{N} (k-1)\, N_k \qquad (101)$$

eine Modifikation des Quellterms innerhalb der Ratengleichungen bedingt. Entsprechende Arbeiten sind in Vorbereitung und Vorschläge für geeignete Modifikationen des EDV - Programms für die numerische Anpassung finden sich im Anhang.

## 6. ZUSAMMENFASSUNG

Mit den vorliegenden Messungen legen wir Ratenkoeffizienten für die Elektronenstoßionisation höher ionisierter Atome vor.

Insgesamt bestimmten wir 48 Werte, darunter erstmalig experimentelle Ergebnisse für hochgeladene wasserstoffähnliche Ionen. Die gute Übereinstimmung gerade dieser Daten mit theoretischen Rechnungen gestattet es uns, systematische Fehler auszuschließen.

Für alle anderen isoelektronischen Sequenzen ergibt sich ein differenzierteres Bild, da die plasmaspektroskopische Methode nur die Bestimmung effektiver Ratenkoeffizienten zuläßt, unter Mitnahme aller plasmaphysikalisch möglichen Effekte. Theoretische Ansätze hingegen liefern meistens die Ionisationsraten des Grundzustandes oder einzelner angeregter Zustände, deren Beiträge als unabhängig voneinander angenommen werden. Ein Vergleich ist dementsprechend oft gar nicht oder nur mit Hilfe bestimmter Annahmen möglich.

Abhilfe kann in dieser Situation nur die detallierte Kenntnis der atomaren Prozeße innerhalb einzelner Ladungszustände schaffen. Zum Verständnis all derjeniger Vorgänge, die in einem komplexen Ion zur effektiven Ionisationsrate beitragen, bedarf es jedoch einer Menge Daten, die zum großen Teil noch nicht vorliegen.

Allerdings sollten aber die experimentell gemessenen effektiven Ionisationsraten die Verhältnisse in heißen Plasmen besser wiedergeben als theoretische oder semiempirische Ratenkoeffizienten für die Grundzustände der Ionen.

## 7. LITERATURVERZEICHNIS


/1/ E. Hinnov ; Phys. Rev. A 14 no.4, 1533 (1976)

/2/ R. Jensen, D. Post, B. Tarter, W. Grasberger und W. Lokke
PPPL Report 1334 (1977)

/3/ M.R.C. McDowell ; Comments Atomic Mol. Phys. 7 no. 1/2,
23 (1977)

/4/ V.A. Boiko, S.A. Pikuz und A.Y. Faenov
J. Phys. B, 12 no.11, 1889, (1979)

/5/ K.T. Dolder und B. Peart ; Rep. Prog. Phys. 39, 693, (1976)

/6/ G.H. Dunn in: Atomic Physics, edited by V.W. Hughes,
V.W. Cohen und F.M.J. Pichanick, Plenum (1969)

/7/ M.F.A. Harrison ; Brit. J. Appl. Phys. 17, 371 (1966)

/8/ H.-J. Kunze ; Space Sci. Rev. 13, 565 (1972)

/9/ R.C. Elton in: Methods of Experimental Physics, vol. 9a
edited by H.R. Griem und R.H. Lovberg
Academic, New York 1970

/10/ van Regemorter ; Astrophys. J. 136, 906 (1962)

/11/ H.-J. Kunze ; Phys. Rev. A 3, 937 (1971)

/12/ R.H. Dixon, D.F. Düchs und R.C. Elton
Phys. Fluids 16 no.10, 1762 (1973)

/13/ G. Lins ; Dissertation Ruhr-Universität Bochum 1980
und Phys. Fluids 1981, im Druck

/14/ E. Fünfer, K. Hain, H. Herold, P. Igenbergs und F.P. Küpper
Z. Naturforschung 17a, 967 (1962)

/15/ Spitzer Jr. L., "Physics of Fully Ionized Gases",
Interscience Publ., New York 1962

/16/ J.A. Stamper und A.W. DeSilva ; Phys. Fluids 12, 1435 (1969)

/17/ S. Maurmann, K.H. Finken und H.-J. Kunze
Phys. Fluids 19, 1551 (1976)

/18/ G. Lins und H.-J. Kunze ; Phys. Fluids 24, 839 (1981)

/19/ R.J. Commisso ; Techn. Rep. No. 76-083, Univ. Maryland

/20/ K. Höthker ; Dissertation Ruhr-Universität Bochum 1975
und Nucl. Fusion 16, 253 (1976)

/21/ T.S. Green ; Phys. Fluids 6 no.6 , 864 (1963)

/22/ W.T. Armstrong, R.K. Linford, J. Lipson, D.A. Platts
und E.G. Sherwood ; Phys. Fluids (1981)

/23/ D.C. Barnes und C.E. Seyler ; Preprint LA-UR-79-13
Los Alamos Scientific Laboratory (1979)

/24/ H.-J. Kunze , " The Laser as a Tool for Plasma Diagnostics" in W. Lochte-Holtgreven (Hrsg.), "Plasma Diagnostics", North Holland, Amsterdam 1968

/25/ A.W. DeSilva und G.C. Goldenbaum, in: Methods of Experimental Physics, Vol. 9a, edited by H.R. Griem und R. Lovberg , Academic , New York 1970

/26/ S. Maurmann ; Diplomarbeit Ruhr-Universität Bochum 1975

/27/ T. Laaspere ; J. Geophys. Res. 65, 3955 (1960)

/28/ Sheffield ; "Plasma Scattering of Electromagnetic Radiation", Academic Press New York 1975

/29/ H.R. Griem , "Plasma Spectroscopy", McGraw-Hill, N.Y. 1964

/30/ E. Dullni ; Diplomarbeit Ruhr-Universität Bochum 1978

/31/ S. Suckewer, E. Hinnov, K. Bol, R. Fonck, R.J. Hawryluk, R.A. Jacobsen, D.M. Meade, M. Okabayashi, G.L. Schmidt, E.H. Silver und J.C. Sinnis
Nuclear Fusion 19 no.12, 1681 (1979)

/32/ W.L. Wiese, "Line Broadening" in: R.H. Huddlestone und S.L. Leonhard (Hrsg.), "Plasma Diagnostic Techniques", Academic Press, New York 1965

/33/ F.E. Irons ; J. Phys. B 6 , 1562 (1973)

/34/ J.D. Garcia und J.E. Mack
J. Opt. Soc. Am. 55 no.6 , 654 (1965)

/35/ H.R. Griem und K.Y. Shen ; Phys. Rev. 122 no.5, 1490 (1961)

/36/ A. Poquerusse ; Phys. Lett. 41A no.5 , 453 (1972)

/37/ J.T. Davies und J.M. Vaughn ; Astrophys.J.137, 1302 (1963)

/38/ P. Greve ; Diplomarbeit Ruhr-Universität Bochum 1975

/39/ A.J. Beaulieu ; Appl. Phys. Lett. 16, 504 (1970)

/40/ L. Ullrich ; Diplomarbeit Ruhr-Universität Bochum 1980

/41/ J. Haumann ; Diplomarbeit Ruhr-Universität Bochum 1980

/42/ P. Greve, J. Haumann, H.-J. Kunze und L. Ullrich
Phys. Fluids, eingereicht 1981

/43/ N. Rostoker und A.C. Kolb ; Phys. Rev. 124, 965 (1961)

/44/ E.P. Velikhov ; Atomnaya Energia 14, 573 (1962)

/45/ J. Taylor ; Plasma Physics 4 , 401 (1962)

/46/ H. Witulski ; IPP Report Jül-1183 Jülich 1975

/47/ M.G. Haines ; Adv. Phys. 14 , 167 (1965)

/48/ C. Ekdahl, R.R. Bartsch, R.J. Commisso, R.F. Gribble,
K.F. McKenna, G. Miller und R.E. Siemon
Phys. Fluids 23 no.9 , 1832 (1980)

/49/ J.P. Freidberg und L.D. Pearlstein
Phys. Fluids 21 , 1207 (1978)

/50/ L.C. Steinhauer ; Phys. Fluids 24 no.2 , 328 (1981)

/51/ E. Hintz und A.C. Kolb ; Phys. Fluids 8 no.7 , 1347 (1965)

/52/ A.C. Kolb und R.W.P. McWhirter
Phys. Fluids 7 no.4 , 519 (1964)

/53/ E. Hintz ; Nucl. Fusion Suppl. Pt. 2 , 601 (1962)

/54/ A.C. Kolb, H.R. Griem, W.H. Lupton, D.T. Phillips, S.A. Ramsden, E.A. McLean, W.R. Faust, M. Swartz Nucl. Fusion Suppl. Pt. 2, 553 (1962)

/55/ S. Uchikawa, H.R. Griem und D.Düchs IPP Rep. 6/199 (Juni 1980)

/56/ W. Engelhardt, Z. Physik 244, 70, (1971)

/57/ K.P. Dere und H.E. Mason, NASA-Skylab Active Region Workshop Monograph, Kap. 6 (1980)

/58/ H. Kever, Dissertation , Aachen 1961

/59/ W. Köppendörfer, IPP Report 1/28 (1964)

/60/ G. Lins, Diplomarbeit, Ruhruniv. Bochum (1975)

/61/ R.L. Morse, Phys. Fluids 16 no.4, 545, (1973)

/62/ J.J. Thomson, Phil. Mag. 23, 449, (1912)

/63/ W.L. Fite und R.T. Brackmann, Phys. Rev. 112,1141 (1958)

/64/ A. Boksenberg, Thesis, Universität London (1960)

/65/ E.W. Rothe, L.L. Marino, R.H. Neynaber, S.M. Trujillo Phys. Rev. 125, 582, (1962)

/66/ M. Gryzinski, Phys. Rev. A138, 305,322,336 (1965)

/67/ R. Abrines, R.I. Percival und N.A. Valentine Proc. Phys. Soc. (London) 89, 515, (1966)

/68/ V. Fock, Z. Physik 98, 145 , (1935)

/69/ M.R. Rudge und M.J. Seaton, Proc. Roy. Soc. (London) A 283, 262 (1965)

/70/ M.R. Rudge, Rev. Mod. Phys. 40 no.1, 564 (1968)

/71/ M.R. Rudge und M.J. Seaton, Proc. Phys. Soc.(London) 83 , 680 (1964)

/72/ L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill N.Y. 1952

/73/ P.G. Burke und A.J. Taylor, Proc. Roy. Soc. (London) A 287, 105 (1965)

/74/ F.B. Malik und E. Trefftz, Z. Naturf. 16a, 583 (1961)

/75/ E. Trefftz, Proc. Roy. Soc. (London) A271, 379 (1963)

/76/ R.K. Peterkop, Sov. Phys. (JETP) 14, 1377 (1962)

/77/ S. Geltman, M.R. Rudge und M.J. Seaton,
Proc. Phys. Soc. (London) 81, 375 (1963)

/78/ Sloan, Proc. Phys. Soc. (London) 85, 435 (1965)

/79/ H.A. Bethe, Ann. Phys. 5, 325, (1930)

/80/ M.J. Seaton, Phys. Rev. 113, 814 (1959)

/81/ D.R. Hartree, Proc. Cambridge Phil. Soc. 24, 111 (1928)

/82/ V. Fock, Z. Phys. 61, 126 (1930) und 62, 795 (1930)

/83/ V.I. Ochkur, Sov. Phys.(JETP) 18, 503 (1964) und
20,1175 (1965)

/84/ R. Akerib und S. Borowitz, Phys. Rev. 122, 1177 (1961)

/85/ J.A. Michael, Thesis, Case Institute of Technology

/86/ V. Veldre, Riga Report 1965, Translation TT-66-1239
John Crerar Library, Chicago 1966

/87/ D.H. Sampson und L.B. Golden, Astr.Phys.J. 170, 169 (1969)

/88/ L.B. Golden und D.H. Sampson, J.Phys. B 10 no11,2229(1977)

/89/ D.H. Sampson und L.B. Golden, J.Phys. B 11 no 3, 541(1978)

/90/ D.H. Sampson und L.B. Golden, J.Phys. B 12 no24,L785(1979)

/91/ L.B. Golden und D.H. Sampson, J.Phys. B 13, 2645 (1980)

/92/ D.L. Moores, L.B. Golden und D.H. Sampson
J.Phys. B 13, 385 (1980)

/93/ D.L. Moores, J.Phys. B 11 no.13, L403 (1978)

/94/ M.R. Rudge und S.B. Schwartz, Proc.Phys.Soc. 88, 563(1966)

/95/ A. Burgess, D.G. Hummer und J.A. Tully
Phil. Trans. R.Soc. A 226, 225 (1970)

/96/ K. Omidvar, Phys. Rev. 177 no.1, 212 (1969)

/97/ D.H. Sampson, A.D. Parks ; Astrophys. J. Suppl. 28, 323 (1974)

/98/ H. Mayer, Los Alamos Scientific Lab. Rep. LA-647 (1947)

/99/ S.M. Younger, Phys. Rev. A 22, 111 (1980)

/100/ S.M. Younger, Phys. Rev. A 22, 1425 (1980)

/101/ E. Clementi, C. Roetti; At.Data Nucl.Data Tables 14, 177 (1974)

/102/ S.M. Younger, Phys. Rev. A 23, 1138 (1981)

/103/ S.M. Younger, Electron impact ionisation cross sections and rates for highly ionized beryllium-like ions ; bisher unveröffentlicht

/104/ M.E. Riley, D.G. Truhlar ; J. Chem. Phys. 63, 2182 (1975)

/105/ S.M. Younger, private Mitteilung 3/1981

/106/ M.J. Seaton, Planet. Space Sci. 12, 55 (1964)

/107/ T. Kato, Nagoya Univ. Rep. IPPJ-AM-2 (1977)

/108/ L.B. Golden, D.H. Sampson, K. Omidvar J. Phys. B 11 no.18, 3235 (1978)

/109/ W. Lotz, Z. Physik 206, 205 (1967); 216, 241 (1968) 220, 466 (1969); 232, 101 (1970)

/110/ W. Lotz, IPP Report 1/50 (1966)

/111/ L.J. Kieffer, G.H. Dunn; Rev. Mod. Phys. 38, 1 (1966)

/112/ W. Lotz, IPP Report 1/47 (1966)

/113/ W. Lotz, IPP Report 1/62 (1967) und IPP 1/72 (1968)

/114/ J.B. Mann, Los Alamos Report LA-UR-81-18 (1981)

/115/ A. Burgess, I.C. Percival; Adv.Atom. Molec. Phys. 4, 109 (1968)

116/ N.F. Mott, H.S.W. Massey ; Theory of Atomic Collisions

/117/ M.J. Seaton, Proc. Phys. Soc. 79, 1105 (1962)

/118/ A. Burgess, H.P. Summers
Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 174, 385 (1976)

/119/ A. Burgess, H.P. Summers, D.M. Cochrane und R.W.P. McWhirter, Mon. Not. Roy. Astron. Soc. 179, 275 (1977)

/120/ A. Burgess, Culham AERE Report 4818, S. 63 (1964)

/121/ **O. Bely und H. van Regemorter**
**Ann.Rev.Astron.Ap. 8, 329 (1970)**

/122/ P. Greve, M. Kato, H.J. Kunze und R.S. Hornady
Phys. Rev. A 24, 429 (1981)

/123/ R.U. Datla, L.J. Nugent und H.R. Griem
Phys. Rev. A 14, 979 (1976)

/124/ H.-J. Kunze, A.H. Gabriel und H.R. Griem
Phys. Rev. 165, 267 (1968)

/125/ A.H. Gabriel und C. Jordan, in "Case Studies in Atomic Collision Physics", North-Holland Amsterdam 1972; Kap.4F

/126/ O. Bely, Phys. Lett. 26A, 408 (1968)

/127/ A.K. Pradhan, D.W. Norcross und D.G. Hummer
Astrophys. J. in Vorbereitung

/128/ H.-J. Kunze, Univ. Maryland Plasma Preprint 81-029 (1981)

/129/ A.H. Gabriel und C. Jordan, wie /125/, Kap. 4D

/130/ R.C. Elton, W.W. Köppendörfer, Phys. Rev. 160, 194 (1967)

/131/ W.L. van Wyngaarden, K. Bhadra und R.J.W. Henry
Phys. Rev. A 20, 1409 (1979)

/132/ A.H. Gabriel,C. Jordan, Mon.Not.R.Astr.Soc. 145, 241 (69)

/133/ D.H. Crandall, R.H. Phaneuf und D.C. Gregory
Oak Ridge Nat. Lab. Report Nr. ORNL/TM-7020 (1979)

/134/ L.P. Presnyakov, Sov. Phys. Usp. 19, 387 (1976)

[135] D.H. Crandall, R.A. Phaneuf, B.E. Hasselquist und D.C. Gregory; J. Phys. B 12, L 249 (1979)

[136] E. Hinnov, J. Opt. Soc. Am. 56, 1179 (1966) und J. Opt. Soc. Am. 57, 1392 (1967)

[137] L.A. Jones, E. Källne, D.B. Thomson J. Phys. B 10, 187 (1977)

[138] W.L. Rowan und J.R. Roberts, Phys. Rev. A 19, 90 (1979)

[139] E. Källne und L.A. Jones, J. Phys. B 10, 3637 (1977)

[140] A.K. Dalla, K. Bleha und H.-J. Kunze Phys. Rev. A 12, [illegible]

[141] D.H. Crandall, Phys. Scripta 23, 153 (1981)

[142] J.R. Roberts, priv. Mitteil. 3/1981

[143] R.C. Elton, Astrophys. J. 148, 573 (1967)

[144] G.W.F. Drake, A. Dalgarno, Astr. J. 157, 459 (1969)

[145] C. Laughlin, J. Phys. B 8, L 400 (1975)

[146] B. Lammers, SFB - Report 77-N4-026 Bochum (1977)

[147] W. Engelhardt, W. Köppendörfer und J. Sommer Phys. Rev. A 6, 1908 (1972)

[148] E. Stingl, J. Phys. B 5, 1160 (1972)

[149] K.T. Dolder, B. Peart, Rep. Prog. Phys. 39, 693 (1976)

[150] R.H. Garstang, L.J. Shamey, Astr. J. 148, 665 (1967)

[151] J.W. Hooper, W.C. Lineberger und F.M. Bacon Phys. Rev. 141, 165 (1966)

[152] B. Peart und K.T. Dolder, J. Phys. B 1, 240 (1968)

[153] B. Peart, S.O. Martin, K.T. Dolder; J. Phys. B 2, 1176 (1969)

[154] B. Edlén, Phys. Scr. 17, 565 (1978)

[155] [illegible] J. Quant. Spec. and Ra. 13, [illegible] (1973)

/156/ R.U. Datla, H.-J. Kunze, D. Petrini;
Phys. Rev. A 6, 38 (1972)

/157/ S.C. Martin, B. Peart und K.T. Dolder
J. Phys. B 1, 537 (1968)

/158/ D.H. Crandall, R.A. Phaneuf und R.A. Falk, G.H. Dunn;
Bull. Am. Phys. Soc. 26, 823 (1981)

/159/ S.M. Younger, Phys. Rev. A Sept. 1981

/160/ R.U. Datla, M. Blaha, H.-J. Kunze; Techn. Rep. TR 75-076
University of Maryland 1975, Preprint Nr. 510P029

/161/ R.L. Brooks, Techn. Rep. 78-100 Univ. Maryland 1978

/162/ A. Müller, E. Salzborn, R. Frodl, R. Becker, H. Klein
und H. Winter; J. Phys. B 13, 1877 (1980)

/163/ R. L. Kelly und L.J. Palumbo, NRL Rep. 7599 (1073)

/164/ R.D. Bleach, J. Opt. Soc. Am. 70, 861 (1980)

/165/ P. Burkhalter, J. Davies, NRL Rep. 3934 (1979)

/166/ O. Bely, Ann. d'Astrophys. 30, 953 (1967)

/167/ L. Goldberg, A.K. Dupree und J. W. Allen
Ann. d'Astrophys. 28, 589 (1965)

/168/ R.C. Cowan und J.B. Mann, Astrophys. J. 232, 940 (1979)

/169/ D.H. Sampson und L.B. Golden, J. Phys. B 12, L 785 (1979)
und J. Phys. B 14, 903 (1981)

/170/ C. Corliss, J. Sugar; J. Phys.Chem.Ref.Data 8, 1 (1979)

/171/ S. Suckewer, E. Hinnov, M. Bitter, R. Hulse, D. Post
Phys. Rev. A 22, 725 (1980)

/172/ B.A. Huber, Habilitationsschrift Ruhr-Universität
Bochum 1981 und priv. Mitteil.

/173/ R.E. Olson, Proc. Int. Conf. Elec. Atom. Coll. S.391 (1980)

/174/ M. Landini, B.C. Monsignori Fossi; Sol.Phys. 20, 322 (1971)

/175/ R.U. Datla, Techn. Rep. 76-212 Univ. Maryland 1976

/176/ J. Magill, J. Phys. D 10, 2257 (1977)

## A N H A N G

### Beobachtete Spektrallinien

| Ion | Übergang | Wellenlänge (Å) | s: side-on<br>e: end -on |
|---|---|---|---|
| B II | $1s^2\,2s^2\,{}^1S - 2s^2p\,{}^1P^o$ | 1362,5 | e |
| | $2s^2\,{}^1S - 2s3p\,{}^1P^o$ | 693,95 | e |
| | $2s2p\,{}^1P^o - 2p^2\,{}^1D$ | 3451,3 | e,s |
| B III | $1s^2\,2s\,{}^2S - 2p\,{}^2P^o$ | 2067,8<br>2076,2 | e,s |
| | $2s\,{}^2S - 3p\,{}^2P^o$ | 518,0 | e |
| | $3d\,{}^2D^o - 4f\,{}^2G$ | 4097,6 | s |
| B IV | $1s^2\,{}^1S - 1s2p\,{}^1P^o$ | 60,7 | e |
| | $1s2s\,{}^3S - 1s2p\,{}^3P^o$ | 2826,7<br>2822,6 | e,s |
| C V | $1s\,{}^2S - 2p\,{}^2P^o$ | 48,6 | e |
| | $1s\,{}^2S - 3p\,{}^2P^o$ | 41,0 | e |
| | $2p\,{}^2P^o - 3d\,{}^2D$ | 262,4 | e |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| | [illegible] | 2296,9 | e,s |
| | [illegible] | [illegible] | e |
| [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| | [illegible] | [illegible] | e |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| C | V | $1s^2\ {}^1S - 1s2p\ {}^1P^o$ | 40,3 | e |
| | | $1s2p\ {}^1P^o - 1s3d\ {}^1D$ | 267,3 | e |
| | | $1s2s\ {}^3S - 1s2p\ {}^3P^o$ | 2270,9<br>2277,9 | e,s |
| | VI | $1s\ {}^2S - 2p\ {}^2P^o$ | 33,7 | e |
| | | $1s\ {}^2S - 3p\ {}^2P^o$ | 28,5 | e |
| | | $2p\ {}^2P^o - 3d\ {}^2D$ | 182,2 | e |
| N | III | $1s^2 2s^2 2p\ {}^2P^o - 2s2p^2\ {}^2D$ | 989,8<br>991,5 | e |
| | | $2s^2 3s\ {}^2S - 3p\ {}^2P^o$ | 4097,3<br>4103,4 | s |
| | IV | $1s^2 2s^2\ {}^1S - 2s2p\ {}^1P^o$ | 765,1 | e |
| | | $2s^2\ {}^1S - 2s3p\ {}^1P^o$ | 247,2 | e |
| | | $2s3s\ {}^3S - 2s3p\ {}^3P^o$ | 3478,7<br>3484,9 | s |
| | V | $1s^2\ 2s\ {}^2S - 2p\ {}^2P^o$ | 1238,8<br>1242,8 | e |
| | | $2s\ {}^2S - 3p\ {}^2P^o$ | 209,3 | e |
| | | $3s\ {}^3S - 3p\ {}^3P^o$ | 4603,8<br>4620,0 | s |
| | VI | $1s^2\ {}^1S - 1s2p\ {}^1P^o$ | 28,8 | e |
| | | $1s2s\ {}^3S - 1s2p\ {}^3P^o$ | 1896,9<br>1907,7 | e |

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| O | IV | $1s^2 2s^2 2p\ {}^2P^o$ - | $2s2p^2\ {}^2D$ | 790,2<br>787,7 | e |
| | | $2s^2 3s\ {}^2S$ - | $2s^2 3p\ {}^2P^o$ | 3071,7<br>3063,5 | s,e |
| | | $2s2p3p\ {}^4D$ - | $2s2p3d\ {}^4F^o$ | 3736,8 | s |
| | V | $1s^2 2s^2\ {}^1S$ - | $2s2p\ {}^1P^o$ | 629,7 | e |
| | | $2s^2\ {}^1S$ - | $2s3p\ {}^1P^o$ | 172,2 | e |
| | | $2s3s\ {}^1S$ - | $2s3p\ {}^1P^o$ | 5114,[illegible] | s |
| | VI | $1s^2 2s\ {}^2S$ - | $2p\ {}^2P^o$ | 1031,[illegible]<br>1037,6 | e |
| | | $2p\ {}^2P^o$ - | $3d\ {}^2D$ | 173,[illegible] | e |
| | | $3s\ {}^2S$ - | $3p\ {}^2P^o$ | 3811,3<br>3834,2 | s |
| | VII | $1s2p\ {}^1P^o$ - | $1s3d\ {}^1D$ | 135,8 | e |
| | | $1s2s\ {}^3S$ - | $1s2p\ {}^3P^o$ | 1623<br>1634 | e |
| F | IV | $1s^2 2s^2 2p^2\ {}^3P$ - | $2s2p^3\ {}^3D^o$ | [illegible] | e |
| | | $2p3d\ {}^1F^o$ - | $2s^2 2p 3p\ {}^1D$ | 2794 | s |
| | V | $1s^2 2s^2 2p\ {}^2P^o$ - | $2s2p^2\ {}^2D$ | 657,3<br>[illegible] | e |
| | | $2s^2 3s\ {}^2S$ - | $2s^2 3p\ {}^2P^o$ | [illegible]<br>2461,[illegible] | [illegible] |
| | VI | $1s^2 2s^2\ {}^1S$ - | $2s2p\ {}^1P^o$ | [illegible] | e |
| | | $2s2p\ {}^1P^o$ - | $2p^2\ {}^1D$ | [illegible] | e |
| | | $2s3s\ {}^1S$ - | $2s3p\ {}^1P^o$ | [illegible],8 | s |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| F | VII | $1s^2\ 2s$ | $^2S$ - | $2p$ | $^2P^o$ | 883,1<br>890,8 | e | |
| | | $3s$ | $^2S$ - | $3p$ | $^2P^o$ | 3246,6<br>3276,6 | s | |
| Ne | V | $1s^2 2s^2 2p^2$ | $^3P$ - | $2s2p^3$ | $^3D^o$ | 570,3 | e | |
| | | $2p3s$ | $^3P^o$ - | $2p3p$ | $^3D$ | 2265,7 | s,e | |
| | VI | $1s^2 2s^2 2p$ | $^2P^o$ - | $2s2p^2$ | $^2S$ | 433,2<br>453,7 | e | |
| | | $2s^2 3p$ | $^2P^o$ - | $2s^2 3d$ | $^2D$ | 2229,1 | s,e | |
| | VII | $1s^2\ 2s^2$ | $^1S$ - | $2s2p$ | $^1P^o$ | 465,2 | e | |
| | | $2s^2$ | $^1S$ - | $2s3p$ | $^1P^o$ | 97,5 | e | |
| | VIII | $1s^2\ 2s$ | $^2S$ - | $2p$ | $^2P^o$ | 770,4<br>780,3 | e | |
| | | $2s$ | $^2S$ - | $3p$ | $^2P^o$ | 88,1 | e | |
| | | $3s$ | $^2S$ - | $3p$ | $^2P^o$ | 2860,1 | s | |
| Al | V | $1s^2 2s^2 2p^5$ | $^2P^o$ - | $2p^4 3s$ | $^2P$ | 130,8 | e | |
| | | $2p^5$ | $^2P^o$ - | $2s2p^6$ | $^2S$ | 278,7<br>281,4 | e | |
| | VI | $1s^2 2s^2 2p^4$ | $^1D$ - | $2p^3 3d$ | $^1F^o$ | 90,2 | e | |
| | | $2p^4$ | $^3P$ - | $2p^3 3s$ | $^3S^o$ | 109,5 | e | |
| | VII | $1s^2 2s^2 2p^3$ | $^2D^o$ - | $2p^2 3d$ | $^2F$ | 78,5 | e | |
| | | $2s2p^4$ | $^2P$ - | $2p^3$ | $^2P^o$ | 332,1 | e | |
| | VIII | $1s^2 2s^2 2p^2$ | $^1D$ - | $2p3d$ | $^1F^o$ | 18,4 | e | |
| | | $2s2p^3$ | $^1P^o$ - | $2p^4$ | $^1D$ | 463,2 | e | |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Al | IX | $1s^2 2s^2 2p$ | $^2P^o$ - | $2s2p^2$ | $^2D^o$ | 384,9<br>392,4 | e |
| | | $2s^2 2p$ | $^2P^o$ - | $2s^2 3d$ | $^2D$ | 61,1 | e |
| Al | X | $1s^2 2s^2$ | $^1S$ - | $2s2p$ | $^1P^o$ | 332,8 | e |
| | | $2s^2$ | $^1S$ - | $2s3p$ | $^1P^o$ | 52,0 | e |
| | | $2s2p$ | $^1P^o$ - | $2p^2$ | $^1D$ | 670,1 | e |
| Al | XI | $1s^2$ $2s$ | $^2S$ - | $2p$ | $^2P^o$ | 568,1<br>550,0 | e |
| | | $2p$ | $^2P^o$ - | $3d$ | $^2D$ | 52,4 | e |
| [illegible] | V | $1s^2 2s^2 2p^6$ | $^1S$ - | $2p^5 3s$ | $^1P^o$ | 117,9 | e |
| | | $2p^6$ | $^1S$ - | $2p^5 3d$ | $^3D^o$ | 96,5 | e |
| [illegible] | VI | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] | [illegible] |
| | | $2p^5$ | $^2P^o$ - | $2s2p^6$ | $^2S$ | 246,0<br>249,1 | e |
| | VII | $1s^2 2s^2 2p^4$ | $^1D$ - | $2p^3 3s$ | $^1D^o$ | 84,1 | e |
| | | $2p^4$ | $^1D$ - | $2s2p^5$ | $^1P^o$ | 217,8 | e |
| | VIII | $1s^2 2s^2 2p^3$ | $^4S^o$ - | $2p^2 3d$ | $^4P$ | 61,1 | e |
| | | $2p^3$ | $^2D^o$ - | $2s2p^4$ | $^2D$ | 276,9 | e |
| | IX | $1s^2 2s^2 2p^2$ | $^1D$ - | $2p3d$ | $^1F^o$ | 56,0 | e |
| | | $2p^2$ | $^3P$ - | $2s2p^3$ | $^3S^o$ | 225,0<br>227,0 | e |
| | X | $1s^2 2s^2 2p$ | $^2P^o$ - | $2s^2 3s$ | $^2S$ | 55,1 | e |
| | | $2s2p^2$ | $^2F$ - | $2p^3$ | $^2D^o$ | 551,2 | e |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 21 | XI | $1s^2 2s^2$ | $^1S$ - | $2s2p$ $^1P^o$ | 303,3 | e |
| | | | $^3P^o$ - | $2s2p$ $^3P$ | 40,4 | e |
| | | $2s2p$ | $^1P^o$ - | $2p^2$ $^1D$ | 334,1 | e |
| | XII | $1s^2$ $2s$ | $^2S$ - | $2p$ $^2P^o$ | 300,7<br>439,4 | e |
| | | $2s$ | $^2S$ - | $3p$ $^2P^o$ | 40,9 | e |
| 22 | VI | $1s^2 2s^2 2p^2$ | $^3P$ - | $3s^2 3p^2$ $^3P^o$ | 462,0<br>457,5 | e |
| | | $3s^2 3p^2$ | $^3P^o$ - | $3s3p^3$ $^3D^o$ | 767,1 | e |
| | VII | $1s^2 2s^2 2p^6$ | | | | |
| | | $3s^2$ | $^1S$ - | $3s3p$ $^1P^o$ | 585,8 | e |
| | | $3s^2$ | $^1S$ - | $3s4p$ $^1P^o$ | 175,5 | e |
| | VIII | $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ | - | $3p$ $^1P^o$ | 700,4<br>714,0 | e |
| | | $3s$ | $^2S$ - | $4p$ $^2P^o$ | 159,9<br>159,2 | e |
| | IX | $1s^2 2s^2 2p^6$ | $^1S$ - | $2p^5 3s$ $^1P^o$ | 48,7<br>49,2 | e |
| | X | $1s^2 2s^2 2p^5$ | $^3P^o$ - | $2p^4 3s$ $^3P$ | 42,3 | e |
| | | $2s^1 2p^6$ | $^2S$ - | $2s2p^5$ $^2P^o$ | 145,5<br>170,5 | e |
| | XI | $1s^2 2s^2 2p^4$ | $^3P$ | $2p^3 3s$ $^3D^o$ | 36,0 | e |
| | | $2s^2 2p^4$ | $^1D$ - | $2p^3 3s$ $^1P^o$ | 151,0 | e |
| | XII | $1s^2 2s^1 2p^3$ | $^4S^o$ | $2p^2 3s$ $^4P$ | 32,1 | e |
| | | $2s^2 2p^3$ | $^3D^o$ - | $2s2p^4$ $^3P$ | 149,3 | e |

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | $^1S$ - | | $^1P^o$ | | e |
| | | | | | | e |
| | | $^3S$ - | | $^3P^o$ | 508,6<br>524,1 | e |
| | | $^3P^o$ - | | $^3D$ | | e |
| | | $^2P^o$ - | | $^2D$ | | e |
| | | $^3P$ - | | $^3P^o$ | | e |
| | | $^1D$ - | | $^1F^o$ | | e |
| | | $^2P^o$ - | $3p^2 3d$ | $^2F$ | 258,6 | e |
| | | $^4S^o$ - | $3s3p^4$ | $^4P$ | 514,2 | e |
| | | $^1D$ - | $3p3d$ | $^1F^o$ | 267,9 | e |
| | | $^1D$ - | $3s3p^2$ | $^1P^o$ | 353,9 | e |
| | | $^2P^o$ - | $3s^2 3d$ | $^2D$ | 289,6<br>295,6 | e |
| | | $^2P^o$ - | $3s3p^2$ | $^2D$ | 471,6<br>480,7 | e |
| | | $^1S$ - | | $^1P^o$ | | e |
| | | $^3S$ | $3s4p$ | $^3P^o$ | 87,7 | e |
| | | $^3S$ - | $4p$ | $^3P^o$ | 460,7<br>479, | e |
| | | $^3S$ | $4p$ | $^3P^o$ | 82,0 | e |
| | | $^3P^o$ - | | $^3S$ | 1[illegible],0<br>1[illegible],4 | e |

| | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Kr | VI | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ | | | | 450,2 | e |
| | | $4s^2 4p$ | $^2P^o$ | - $4s^2 4d$ | $^2D$ | 465,3 | |
| | | $4s^2 4p$ | $^2P^o$ | - $4s4p^2$ | $^2D$ | 705,8 | e |
| | | | | | | 742,8 | |
| | VII | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ | | | | | |
| | | $4s^2$ | $^1S$ | - $4s4p$ | $^1P^o$ | 585,4 | e |
| | | $4s4p$ | $^3P^o$ | - $4p^2$ | $^3P$ | 618,7 | e |
| | VIII | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ | $^2S$ | - $4p$ | $^2P^o$ | 695,9 | e |
| | | $4s$ | | | | 651,6 | |
| | IX | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^{10}$ | $^1S$ | - $3d^9 4p$ | $^1P^o$ | 115,7 | e |
| | | $3d^9 4d$ | $^1D$ | - $3d^9 4f$ | $^1F^o$ | 477,9 | e |
| | X | $1s^2 2s^2 2p^6$ $3s^2 3p^6 3d^9$ | $^2D$ | - $3d^9 4p$ | | 99,7 | e |
| | | | | | | 102,2 | |

Quellterme

Nicht stationäre atomphysikalische Prozeße in Plasmen werden oft durch Ratengleichungen beschrieben, d.h. lineare gekoppelte Differentialgleichungen der Form:

$$dN_j/dt = \sum_j B_{ij} N_i \qquad (A\ 1)$$

Hierbei enthalten die Raten $B_{ij}$ alle atomphysikalischen Vorgänge, mit denen eine Änderung der Besetzungsdichte des Zustandes j ($N_j$) verbunden ist. Das Gleichungssystem ist in der Regel abgeschlossen, d.h. es gilt zu jedem Zeitpunkt:

$$\sum_j dN_j = 0 \qquad (A\ 2)$$

Zur Lösung eines solchen Gleichungssystems gibt es viele, z.T. recht einfache Algorithmen /176/.

Ändern nun makroskopische Einflüße wie Teilchenflüße oder Kompression des Plasmas die Besetzungsdichten insgesamt, so müssen sie entsprechend berücksichtigt werden. Ein derartig modifizierter Ansatz zur Berücksichtigung der Teilchenflüße in Tokamak-Plasmen ist z.B. bei der Berechnung von Strahlungsverlusten durch Verunreinigungsionen durch das TFR - Team beschrieben (Nucl. Fus. 15, 1053 1975).

Bei Theta-Pinch Plasmen hingegen gilt es die Kompression angemessen mit einzubeziehen. Dies geschieht -ohne die etwas längliche Ableitung hier auszuführen- durch den sogenannten Quellterm

$$-(N_k \cdot dV)/(V \cdot dt) \qquad (A\ 3)$$

der zu jeder der gekoppelten Differentialgleichungen auf der rechten Seite zu addieren ist. Er bringt genau jenen Anteil an der relativen Besetzungsdichtenänderung des Zustands k in Abzug, der durch die Volumenkompression dV/V verursacht wird.

Nun ist aber die relative Änderung des Plasmavolumens in der Zeit experimentell schwer zu bestimmen. Daher formt man den Quellterm meist unter der Annahme der Quasineutralität des Plasmas um.

$$N_e = \sum_{a,j} (Z^a - R_j)\, N_j^a \qquad \text{(A 4)}$$

$N_j^a$ ist die Besetzungsdichte des Ladungszustandes j des Atoms a mit der Kernladung $Z^a$ und den Restelektronen $R_j$.

Bei Wasserstoffplasmen gilt $N_e = N_i$ solange man die Konzentrationen der Verunreinigungsatome so niedrig hält, daß die Summe aller durch Ionisation freiwerdender Elektronen -außer derjenigen des Wasserstoffs- nicht zur Elektronendichte beitragen.

$$N_e \gg \sum_{a,j} (j-1)\, N_j^a \qquad \text{(A 5)}$$

Nimmt man an, daß die Gesamtzahl der Teilchen im Plasma konstant bleibt ( $N_i \cdot V = \text{const.}$), so gilt:

$$- dV/V = dN_i/N_i = dN_e/N_e \qquad \text{(A 6)}$$

Somit kann der Quellterm durch die experimentell bestimmbare Elektronendichteänderung ausgedrückt werden.

$$(N_k \cdot dN_e)/(N_e \cdot dt) \qquad \text{(A 7)}$$

In dieser Form wird er in der Regel in allen Programmen mit berücksichtigt, die auf Theta-Pinch Entladungen zugeschnitten sind (vgl. Ref./175/).

Geht man nun zu anderen Füllgasen als Wasserstoff über, z.B. Neon, so gilt die Beziehung (A 5) nicht mehr, sondern die Quasineutralität erfordert geradezu, daß die Elektronendichte ganz durch die ionisierten Elektronen bestimmt wird.

$$N_e = \sum_{j} (j-1)\, N_j \qquad \text{(A 8)}$$

Man kann unter diesen Bedingungen die Kompression des Plasmas nur dann noch durch die Änderung der Elektronendichte erfassen, wenn man vorher die durch Inisation erzeugten Elektronen in Abzug bringt.

$$- (N_k \, dV)/(V \, dt) = (N_k/dt) \, (dN_e - \sum_k (k-1) \, dN_k)/N_e \quad (A\ 9)$$

Gleichzeitig muß Bed. (A 8) erfüllt sein.

Durch einen so beschaffenen Quellterm verliert das Gleichungssystem (A 1) jedoch seine Linearität, da zur Berechnung der rechten Seiten die zu berechneneden Zuwächse $dN_k$ benötigt werden. Eine Lösung ist nur noch durch Iteration möglich, d.h. bei jedem auszuführenden Zeitschritt der Integration werden die Zuwächse $dN_k$ solange variiert, bis das Gleichungssystem (A 1) unter Berücksichtigung des Quellterms (A 9) zusammen mit der Nebenbedingung (A 8) erfüllt ist. Eine solche Prozedur leistet die folgende Programm-Modifikation, die hier erstmalig vorgestellt wird, und die an Stelle der Zeilen 112 bis 127 auf Seite 32 von Ref./175/ einzufügen ist.

```
C
C     DIFFERENTIALGLEICHUNGEN
C
          XABL=0.0
          NLAM=0
          XLAM=0.0
 89       IF(NA-1) 70,70,71
 70         SYR=0.0
          NLAM=NLAM+1
          YR(J,1)=-DNE(J)*(Y(J,1)*S(1)-Y(J,2)*ALPHA(2))+XABL*Y(J,1)
        NAA = 2
        GO TO 72
 71     NAA = NA
          SYR=0.0
          NLAM=NLAM+1
        ALPHA(NA)=0.0
        S(NA - 1)    0.0
 72     DO 8 K = NAA,ION1
          YR(J,K)=DNE(J)*(S(J,K-1)*S(K-1)*Y(J,K+1)*ALPHA(K+1)
     1       -Y(J,K)*(S(K)+ALPHA(K))) + XABL*Y(J,K)
 8        CONTINUE
        K = ION
        YR(J,K)=DNE(J)*(Y(J,K-1)*S(K-1)-Y(J,K)*ALPHA(K)) + XABL*Y(J,K)
        DO 88 K=1,ION
        SYR=SYR+(1.-1.)*YR(J,K)
 88       CONTINUE
        XLAM=XABL-SYR/DNE(J)
        XABL=XABL+XLAM
        RLAM=ABS(XLAM/XABL)
        IF(NLAM.GT.100) GOTO 92
        IF(RLAM-0.001) 92,89,89
 92       RETURN
        END
```

```
C
C
C
C       PROGRAMM ZUR BERECHNUNG DER IONISATIONSRATEN
C       RATEN NACH ECIP
C
C
C
      CALL ASSIGN (9,'DX1:START.DAT')
      CALL ASSIGN (10,'VT:/C')
      DIMENSION IP1(10)
      DIMENSION IP(10),NR(10),F1(10),F2(10),F3(10),F4(10)
      DATA IP/10*'  '/,NR/10*0/,F1,F2,F3,F4/40*0.0/
      DIMENSION NAME(4),ITEXT(40), FELD(1300)
      DATA IP1/10*0/
      DIMENSION X(10),OM(10),CHI(50)
      DATA NAME(1)/3RDX1/,NAME(4)/3RDAT/
      DATA FELD/1300*0./,ITEXT/40*' '/
      DATA X/0.137793,0.729455,1.808343,3.401434,5.552496,
     1  8.330153,11.843786,16.279258,21.996586,29.920697/,
     2  OM/0.308441,0.401120,0.218068,0.620875E-01,0.95015E-02,
     3  0.753008E-03,0.282592E-04,0.424931E-06,0.183956E-08,
     4  0.991183E-12/
      DATA CHI/50*0.0/
      READ(9,99) (ITEXT(I),I=1,40)
99      FORMAT(40A1)
      READ(9,100) NZ,N
      READ(9,101) IZ
      DO 987 I=1,IZ
987      READ(9,102) IP(I),IP1(I),NR(I),CHI(I),F1(I),F2(I),F3(I),F4(I)
      READ(9,103) RKTA,RKTE,DELKT
100      FORMAT(2I3)
101      FORMAT(I2)
102      FORMAT(A2,I2,I3,5F11.5)
103      FORMAT(3F11.5)
      WRITE (10,204) (ITEXT(I),I=1,40)
204      FORMAT(/'    RATEN NACH ECIP'/,5X,40A1/)
      WRITE (10,200) RKTA,RKTE
      WRITE (10,201) DELKT
      Z=NZ-N+1
200      FORMAT(5X,'ENERGIE VON      ',F9.2,' EV  BIS ',F9.2,' EV')
201      FORMAT(4X,'SCHRITTWEITE                  ',F9.2,' EV')
      WRITE(10,189)
189      FORMAT(2X,////,9X,'KT[EV]',6X,'COEF',/)
      RKT=RKTA
      NDAT=0
      Z=NZ-N+1
      DO 7 I=1,IZ
      IF(NR(I).EQ.0)GOTO 7
      CHI(I)=CHI(I)/13.606
7      CONTINUE
36      COEF=0.0
      DO 11 NE=1,IZ
      IF(NR(NE).EQ.0) GOTO 11
      SUM=0.0
      AN=Z/SQRT(CHI(NE))
```

```
      DO 12 K=1,10
      EPS=RKT*X(K)/13.606+CHI(NE)
      B=(EPS-CHI(NE))/CHI(NE)
      C1=B-(B+1)*ALOG(B+1.0)*(B+2)
      C2=1.0-1.0/(B+1)**3
      Q=C1/(B+2)+0.65343*C2*YP(Z,AN,B)/AN
      Q=4*Q/((B+1)*CHI(NE)**2)
      SUM=SUM+EPS*Q*OM(K)
12      CONTINUE
      A=13.606*CHI(NE)/RKT
      COEF=COEF+NR(NE)*SUM*EXP(-A)
11      CONTINUE
      COEF=21.7203E-09*COEF*SQRT(13.606/RKT)
      NDAT=NDAT+1
      FELD(NDAT+100)=RKT
      FELD(NDAT+200)=COEF
      IF(AMOD(RKT,50.).EQ.0.) WRITE(10,580) RKT,COEF
580     FORMAT(3X,F9.0,5X,E11.4)
      IF(RKT.GE.RKTE) GOTO 888
      RKT=RKT+DELKT
      GOTO 36
888     FELD(99)=NDAT
      CALL WORT(NAME)
      CALL INOUT(2,FELD,NAME,1300)
      PAUSE 'AUSGABE TT, SONST CTRL C PROGRAMMENDE '
      CALL CLOSE (10)
      CALL ASSIGN(10,'TT:/C')
      WRITE(10,301) (ITEXT(I),I=1,40)
301     FORMAT(5X,'   ECIP ',40A1,///,2X)
      DO 310 M=1,600
      IF(AMOD(FELD(M+100),50.).NE.0.) GOTO 312
      IF(FELD(M+100).EQ.0.) GOTO 312
      WRITE(10,300) FELD(M+100),FELD(M+200)
300     FORMAT(5X,F9.2,5X,E15.5)
312     CONTINUE
310     CONTINUE
      STOP
      END
```

Zusammenstellung empirischer Formeln für den Ionisationswirkungsquerschnitt durch Elektronenstoß.

$Q_i$ : Wirkungsquerschnitt ; $E_s$ : Elektronenenergie (eV)
$E_i$ : Ionisationsenergie (eV) ; $X_i$ : $E_s/E_i$
$r_i$ : Anzahl der gleichwertigen Elektronen pro Schale
a, b : individuelle Konstanten, die in den entsprechenden Arbeiten aufgeführt sind.

Die folgenden Formeln gelten stets für eine Schale. Um den totalen Wirkungsquerschnitt zu erhalten ist über alle Schalen mit $E_s > E_i$ zu summieren.

(E 1) : Elwert, Z. Naturf. 7a, 432 (1952)

$$Q_i = 3{,}3\cdot10^{-14}\cdot r_i\cdot(X_i-1)/E_i^2\cdot(0{,}7 + 0{,}3\cdot X_i)$$

(E 2) : Knorr , Z. Naturf. 13a, 941 (1958)

$$Q_i = 6{,}5\cdot10^{-14}(r_i/a)\cdot(1/E_i^2)\cdot\ln X_i/(X_i+b)$$

(E 3) : Gryzinski, Phys. Rev 115, 374 (1959)

$$Q_i = 6{,}5\cdot10^{-14}\cdot r_i\cdot(1/E_i^2)\cdot(X_i/X_i+1)^{1,5}\cdot(5/3X - 2/X_i^2) \text{ für } X_i \geq 2$$

$$Q_i = 6{,}5\cdot10^{-14}\cdot r_i\cdot(1/E_i^2)\cdot(X_i/X_i+1)^{1,5}\cdot(4\sqrt{2}/3X_i)(1-1/X_i)^{1,5} \text{ für } 1\leq X_i\leq 2$$

(E 4) : Gryzinski, Phys. Rev. A138, 336 (1965)

$$Q_i = 6{,}5\cdot10^{-14}\cdot r_i\cdot 1/(E_s E_i)\cdot\sqrt{(X_i-1)/(X_i+1)}^{3}\cdot\left\{1+\tfrac{2}{3}(1-1/2X_i)\cdot\ln\left[2{,}7+\sqrt{(X_i-1)}\right]\right\}$$

(E 5) : Post, Plasma Phys. 3, 273 (1961)

$$Q_i = 2{,}5\cdot10^{-14}\cdot r_i\cdot\ln X_i/(E_i E_s)$$

(E 6) : Drawin, Z. Phys. 164, 513 (1961)

$$Q_i = 4{,}3\cdot10^{-14}\cdot a\cdot(X_i-1)/(E_s E_i)\ \ln(1{,}25\cdot b\cdot X_i)$$

(E 7) : Seaton, Planet. Space Sci. 12, 55 (1964)

$$Q_i = 3{,}5 \cdot 10^{-14} \cdot (r_i/E_i) \cdot (1 - E_i/E_s)$$

(E 8) : Becker et. al., IEEE Trans.Nucl.Sci. NS-19, 125 (1972)

$$Q_i = 1{,}6 \cdot 10^{-14} \cdot 1/(E_s E_i) \cdot \ln(E_s/E_i)$$

Ein Vergleich verschiedener empirischer Ansätze mit den Rechnungen von Golden und Sampson erschien gerade : Y. Itikawa und T. Kato , Report IPPJ-AM-17, Institute of Plasma Physics, Nagoya University .

Mein Dank gilt an erster Stelle Herrn Prof. Dr. Kunze für die Anregung zu dieser Arbeit und deren stetiger Betreuung.

Mein Dank gilt ferner Herrn Dr. Hornady und Herrn Dr. Kato für ihre Hilfe bei der Konzipierung und dem Aufbau der Theta-Pinch Anlage sowie bei den vorbereitenden Messungen.

Herrn Dr. Roberts und Herrn Dr. Younger danke ich für wertvolle Diskussionen und die Überlassung von Unterlagen vor der Veröffentlichung.

Herrn Schwanke danke ich für seine Hilfe bei den umfangreichen numerischen Arbeiten.

Nicht zuletzt gilt mein Dank allen nichtwissenschaftlichen Mitarbeitern des Instituts und der Feinmechanischen Werkstatt, ohne deren Hilfe der Aufbau und die Instandhaltung der gesamten Anlage nicht möglich gewesen wäre.

Die vorliegende Arbeit wurde am Lehrstuhl V des Instituts für Experimentalphysik der Ruhr-Universität Bochum durchgeführt.

Das Forschungsvorhaben wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unterstützt.

Lebenslauf

| | |
|---|---|
| 17.08.49 | Geburt als zweites Kind des Steuerrats August Greve und seiner Frau Johanna geb. Kleisaat |
| 4.56 | Einschulung in die kath. Keplerschule Essen |
| 4.60 | Wechsel zum neusprachlichen Humboldt-Gymnasium |
| 28.05.68 | Abitur am Humboldt-Gymnasium Essen |
| ab 10.68 | Studium der Mathematik und Physik an der Ruhr-Universität Bochum |
| 12.11.70 | Diplomvorprüfung in Physik |
| 11.08.72 | Zwischenprüfung in Mathematik |
| ab 10.73 | Diplomarbeit in experimenteller Plasmaphysik bei Prof. Dr. Kunze. Thema der Arbeit:"Spektroskopische Bestimmung von Elektronendichte und Temperatur des Anfangsplasmas einer Theta-Pinch-Entladung" |
| 1.08.74 | Heirat mit Ursula Hattop |
| 21.10.75 | Abschluß der Diplomhauptprüfung in Physik |
| ab 11.75 | Wissenschaftlicher Mitarbeiter von Prof. Dr. Kunze am Lehrstuhl V des Instituts für Experimentalphysik der Ruhr-Universität Bochum |
| 31.05.77 | Geburt der Tochter Sonja |
| 23.07.79 | Geburt des Sohns Christian |

**D. GRÄBNER**
DISSERTATIONS U. OFFSETDRUCKEREI

Gotenstraße 3
8602 Altendorf bei Bamberg
Telefon: 09545/8791